

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО
УНІВЕРСИТЕТУ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

СЕРІЯ ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК №4, 2013

**Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка,
випуск №4, 2013
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 національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки” включено до переліку фахових видань ВАК України та реферується в Реферативному журналі та базах даних ВИНІТИ, Росія, Москва.

Редакційна колегія:

Анісімов Анатолій Васильович, чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф., **головний редактор**;
Хусаїнов Денис Ях'євич, д.ф.-м.н., проф.,
заступник головного редактора, відповідальний за видання;
Акіменко Віталій Володимирович, д.т.н., проф.;
Анісімов Ігор Олексійович, д.ф.-м.н., проф.;
Буй Дмитро Борисович, д.ф.-м.н., проф.;
Булавін Леонід Анатолійович, акад. НАН України, д.ф.-м.н., проф.;
Волошин Олексій Федорович, д.т.н., проф.;
Гарашенко Федір Георгійович, д.т.н., проф.;
Данилов Вадим Васильович, д.ф.-м.н., проф.;
Єжов Станіслав Миколайович, д.ф.-м.н., проф.;
Заславський Володимир Анатолійович, д.т.н., доц.;
Кириченко Володимир Васильович, д.ф.-м.н., проф.;
Козаченко Юрій Васильович, д.ф.-м.н., проф.;
Кудін Володимир Іванович, д.т.н., с.н.с.;
Левитський Сергій Михайлович, д.ф.-м.н., проф.;
Макара Володимир Арсенійович, чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф.;
Макарець Микола Володимирович, д.ф.-м.н., проф.;
Маципура Володимир Тимофійович, д.ф.-м.н., проф.;
Перестюк Микола Олексійович, акад. НАН України, д.ф.-м.н., проф.;
Погорілий Сергій Дем'янович, д.т.н., проф.;
Скришевський Валерій Антонович, д.ф.-м.н., проф.

Редакційний відділ:

Анісімова Тетяна Харитонівна, **відповідальний секретар**;
Безущак Оксана Омелянівна, bezusch@univ.kiev.ua;
Стукаленко Вікторія Віталіївна, stu@univ.kiev.ua;
Родіонова Тетяна Василівна, rodtv@univ.kiev.ua;
Хмелюк Надія Кузьмівна, khmeluk@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, 4 д, 03680 Тел. (044) 259-01-49

ISBN 978-966-2142
ISSN 1812-5409

ЗМІСТ

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

Borysenko O.D., Borysenko O.V., Borysenko D.O. Averaging method for autonomous third order random oscillating system	7
Ganyushkin O.G., Desiateryk O.O. Variants of a semilattice	12
Kochubinska E.A. On combinatorics of wreath product of finite symmetric inverse semigroups	17
Lisykevych V., Prishlyak O. Layers and topological equivalent of m-functions.	21
Shevchenko G.M. Local times for multifractional square Gaussian processes	27
Курченко О.О. Аналог сталої Ойлера для функції двох змінних	32

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Lavrenyuk M.V. The stress-strain of plate containing elliptic multicoated inclusion under nonuniformly distributed loading	37
Вакал Ю.Є. Дослідження руху забруднень з урахуванням процесу сорбції	41
Голіченко О.Л. Рух рідини всередині циліндра при переключенні швидкості на границі	45
Константінов О.Ю., Грінюк Ю.М. Істотний спектр однієї нееліптичної граничної задачі	51
Краснопольська Т.С., Спектор В.М. Експериментальні дослідження збудження хрестоподібних хвиль	55
Паткін Є.Д. Приклад побудови мартингальних мір	59
Романенко В.М. Про обмежені розв'язки диференціального рівняння з G-секторіальним операторним коефіцієнтом	63
Сивак О.А. Неперервні розв'язки лінійних функціонально-різницевого рівнянь та їх властивості	67

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Antosyak P.P. About one generalization of weak Condorcet's principle	73
Shatyko A.V. On stabilization of neutral type nonlinear indirect scalar processes	78
Yatsenko V.O., Kochkodan O.I., Makarychev M.V., Pashenkovska I.S., Cheremnikh S.O. Linear and nonlinear analysis of time series: correlation dimension, Lyapunov exponents, and prediction	84
Анікушин А.В. Узагальнена розв'язність гіперболічних інтегро-диференціальних рівнянь	90
Гаркуша Н.І. Динаміка моделі Гудвіна з післядією	96
Голік А.О. Стандартизація геометричних характеристик в задачі розпізнавання дактильної мови жестів	100
Дегтяр О.С. Алгоритм розв'язання задачі оцінювання концентрації хлорофілу за допомогою введення параметру регуляризації	104
Зуб С.С., Зуб С.І. Група одиничних кватерніонів S^3 і пов'язана з нею симплектична і пуассонова структури	108
Івохін Є.В. Про схеми формалізації динамічних процесів в нечітких різницево-системах	114
Капустян О.А. Дослідження динаміки розв'язків задачі оптимального керування для параболічного рівняння	118
Кудін В.І. Про аналіз властивостей чистих стратегій матричної гри у змішаних стратегіях методом базисних матриць	122
Литвиненко І. О., Лебедев Є. О. Оптимізація системи обслуговування з багатьма виконавцями та з рекурентним потоком заявок різних типів	126
Макушенко І.А. Двокритеріальна задача керування напрямком вхідного потоку для багатоканальних мереж немарковського типу	130
Мартинюк П.М., Гошко О.В. Математична модель фільтраційної консолідації ґрунтів з урахуванням багатофракційної суфозії	136
Марценюк В.П., Гандзюк Н.М. Побудова експоненціальної оцінки для нелінійної невід'ємної системи із запізненням на основі нерівності Хейла – Лунела	142
Марченко О.О. Алгоритм конвертації дерева залежностей у керуючий простір синтаксичної структури речення	146
Мащенко С.О. Мінімаксний критерій прийняття рішень при нечіткій множині станів природи	152
Покутний О.А. Узагальнено-обернений оператор в просторах Фреше, Банана та Гільберта	158

Прусов В.А., Дорошенко А.Ю., Кацалова Л.М., Бекетов О.Г. Паралельні обчислення двовимірної задачі конвективної дифузії на відеокарті	162
Рузич Р.В. «Генетичні» особливості біогеценозів	166
Рутицька В.В. Якісний аналіз розв'язків задач оптимального інвестування	173

РАДІОФІЗИКА

Pud S.A., Petrychuk M.V., Kovalenko V.F. Effect of gamma radiation treatment on transport properties of silicon nanowire field effect transistors	179
Коваленко В.Ф., Петричук М.В., Танигін Б.М., Шулима С.І. Особливості поведінки кластерів в магнітній рідині при її циклічному нагріванні та охолодженні в магнітному полі	183
Козинець О.В. Розрахунок фотоструму кремнієвого сонячного елемента з модифікованим шаром	189
Кузнєцов Г.В., Тіщенко І.Ю., Ботурчук Є.Я. Фізичні властивості нанопорошку, отриманого в плазмі з прекурсору SiH ₄	193
Слісненко Ю.А. Використання рівняння Гельмгольца дробового порядку для опису поширення електромагнітного випромінювання у оптичних хвиляводах	197

СУЧАСНА ФІЗИКА

Альохін О.Д., Білоус О.І. Малі критичні показники α_t , α_u , η критичного флюїду і їх фізична основа	203
Атамась Н.О., Меклеш В.Г. Локальна структура нескінченно розведеного водного розчину NaCl за надкритичних умов	207
Булавін Л. А, Савенко В. С., Лебовка М.І. Фазові переходи у воді, наповненій нанодисками	211
Вишневецький С.Ю., Дмитрук І.М., Науменко А.П., Брікс Ю.Л., Сломінський Ю.Л. Особливості взаємодії поліметинових барвників із напівпровідниковими наночастинками при низьких температурах	217
Гаврюшенко Д.А. Розподіл концентрації в клиноподібній порожнині	223
Гоменюк О.В., Шелудько В.І., Неділько С.Г., Бойко В.В., Антрапцева Н.М., Вірко С.В. Люмінесцентні властивості пірофосфатів цинку/мангану: Zn _{2-x} Mn _x P ₂ O ₇ (x = 0 ÷ 2). Частина 1: Безводні фосфати	227
Горбар Е.В. Кіральний ефект розділення в релятивістській матерії в зовнішньому магнітному полі у просторі з границями	233
Єщенко О.А. Оптична анізотропія шаруватих метал-діелектричних наноструктур на основі щільних 2D-масивів наночастинок срібла	235
Зеленський С.Є., Копишинський О.В. Індуковане лазером теплове випромінювання поверхневих шарів з температурно-залежним коефіцієнтом поглинання	241
Кондратенко С.В., Козирев Ю.М., Сторожук Д.П. Вплив nanoострівців SiGe на процеси рекомбінації в гетероструктурах Si/Ge з nanoострівцями SiGe	249
Макарець М.В., Чолій Я.В. Рівняння для кумулянтів просторового розподілу імплантованих іонів	255
Момот А.І. Аналіз механізмів згасання іонно-звукових хвиль у заповненій плазмі	261
Овсієнко І.В. Електро-транспортні властивості отриманого хімічним методом нанографіту	265
Попов О.Ю., Клепо О.Ю., Суляліна О.Д. Реакційний синтез композиційного матеріалу на основі TiB ₂	269
Сніцєрова О.М. Ящук В.М., Терентьєва Ю.Г. Можливості люмінесцентних методик дослідження біологічних тканин для медичних застосувань	275
Чумаченко А.В. Розрахунок фазових переходів в одновимірній моделі Ізінга методом розкладу за сингулярними значеннями	281
Якунов А.В., Кузькова Н.В. Застосування температурної залежності флуоресценції розчинів органічних барвників для вимірювання поглинання міліметрових хвиль у воді	285
Ящук В.П., Смалюк А.П. Енергетичні закономірності вимушеного комбінаційного розсіювання родаміна 6Ж в сильнорозсіювальному середовищі	289

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРИЯ ТА ТЕОРИЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

УДК 519.21

О.Д. Борисенко¹, к.ф.-м.н., доцент
О.В. Борисенко², к.ф.-м.н., доцент
Д.О. Борисенко³, студент

Метод усереднення для автономної випадкової коливної системи третього порядку

У роботі вивчається асимптотична поведінка автономної коливної системи, яка описується диференціальним рівнянням третього порядку з малими нелінійними зовнішніми збуреннями типу багатовимірною "білого" та Пуассонівського шумів.

Ключові слова: метод усереднення, автономна коливна система, стохастичне диференціальне рівняння.

^{1,3}Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Володимирська, 64. ² Національний технічний університет України "КПІ" 03056, г.Київ-56, проспект Перемоги, 37

E-mails: ¹odb@univ.kiev.ua

Communicated by Prof. Kozachenko Yu.V.

1 Introduction

The overview of papers devoted to the averaging method, proposed by N.M.Krylov, N.N.Bogolyubov [1], and its applications to random oscillatory systems of different types is presented in O.D.Borysenko, O.V.Borysenko [2] with corresponding references.

This paper deals with investigation of the behaviour, as $\varepsilon \rightarrow 0$, of the general type third order autonomous oscillating system described by stochastic differential equation

$$\begin{aligned} x'''(t) + ax''(t) + b^2x'(t) + ab^2x(t) = \\ = \varepsilon^{k_0} f_0(x(t), x'(t), x''(t)) + \\ + f_\varepsilon(x(t), x'(t), x''(t)) \end{aligned} \quad (1)$$

with non-random initial conditions $x(0) = x_0, x'(0) = x'_0, x''(0) = x''_0$, where $\varepsilon > 0$ is a small parameter, $f_\varepsilon(x, x', x'')$ is a random function such that

$$\begin{aligned} \int_0^t f_\varepsilon(x(s), x'(s), x''(s)) ds = \\ = \sum_{i=1}^m \varepsilon^{k_i} \int_0^t f_i(x(s), x'(s), x''(s)) dw_i(s) + \\ + \varepsilon^{k_{m+1}} \int_0^t \int_{\mathbb{R}} f_{m+1}(x(s), x'(s), x''(s), z) \nu(ds, dz), \end{aligned}$$

O.D. Borysenko¹, Ph.D., Associate Professor
O.V. Borysenko², Ph.D., Associate Professor
D.O. Borysenko³, Student

Averaging method for autonomous third order random oscillating system

The asymptotic behavior of autonomous oscillating system describing by differential equation of third order with small non-linear external perturbations of multidimensional "white noise" and "Poisson noise" types is studied.

Key Words: averaging method, autonomous oscillating system, stochastic differential equation.

^{1,3}National Taras Shevchenko University of Kyiv, 01033, Kyiv, 64 Volodymyrska st., ²National Technical University of Ukraine "KPI", 37 Prospect Peremogy, Kyiv 03056

$k_i > 0, i = \overline{0, m+1}; f_i, i = \overline{0, m+1}$ are non-random functions; $w_i(t), i = \overline{1, m}$ are independent one-dimensional Wiener processes; $\tilde{\nu}(dt, dy) = \nu(dt, dy) - \Pi(dy)dt$, $E\nu(dt, dy) = \Pi(dy)dt$, $\nu(dt, dy)$ is the Poisson measure independent on $w_i(t), i = \overline{1, m}$; $\Pi(A)$ is a finite measure on Borel sets $A \in \mathbb{R}, a > 0, b > 0$.

We will consider the equation (1) as the system of stochastic differential equations

$$\begin{aligned} dx(t) &= x'(t)dt, \\ dx'(t) &= x''(t)dt, \\ dx''(t) &= [-ax''(t) - b^2x'(t) - ab^2x(t) + \\ &+ \varepsilon^{k_0} f_0(x(t), x'(t), x''(t)) + \\ &+ \varepsilon^{k_{m+1}} \int_{\mathbb{R}} f_{m+1}(x(t), x'(t), x''(t), z) \Pi(dz)]dt + \\ &+ \sum_{i=1}^m \varepsilon^{k_i} f_i(x(t), x'(t), x''(t)) dw_i(t) + \\ &+ \varepsilon^{k_{m+1}} \int_{\mathbb{R}} f_{m+1}(x(t), x'(t), x''(t), z) \tilde{\nu}(dt, dz), \\ x(0) &= x_0, x'(0) = x'_0, x''(0) = x''_0. \end{aligned} \quad (2)$$

In what follows we will use the constant $K > 0$ for the notation of different constants, which are not

depend on ε .

2 Auxiliary result

From Borysenko O. and Malyshev I. [3], using the obvious modifications we obtain following results

Lemma 1. *Let for each $x \in \mathbb{R}^d$ there exists*

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_A^{T+A} f(t, x) dt = \bar{f}(x)$$

uniformly with respect to A , the function $\bar{f}(x)$ is bounded, continuous, function $f(t, x)$ is bounded and continuous in x uniformly with respect to (t, x) in any region $t \in [0, \infty)$, $|x| \leq K$, and stochastic processes $\xi(t) \in \mathbb{R}^d$, $\eta(t) \in \mathbb{R}$ are continuous, then

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^t f\left(\frac{s}{\varepsilon} + \eta(s), \xi(s)\right) ds = \int_0^t \bar{f}(\xi(s)) ds$$

almost surely for all arbitrary $t \in [0, T]$.

Remark 1. *Let $f(t, x, z)$ is bounded and uniformly continuous in x with respect to $t \in [0, \infty)$ and $z \in \mathbb{R}$ in every compact set $|x| \leq K$, $x \in \mathbb{R}^d$. Let $\Pi(\cdot)$ be a finite measure on the σ -algebra of Borel sets in $\mathbb{R}$ and let*

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_A^{T+A} f(t, x, z) dt = \bar{f}(x, z),$$

uniformly with respect to A for each $x \in \mathbb{R}^d$, $z \in \mathbb{R}$, where $\bar{f}(x, z)$ is bounded, uniformly continuous in x with respect to $z \in \mathbb{R}$ in every compact set $|x| \leq K$. Then for any continuous processes $\xi(t) \in \mathbb{R}^d$ and $\eta(t) \in \mathbb{R}$ we have

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^t \int_{\mathbb{R}} f\left(\frac{s}{\varepsilon} + \eta(s), \xi(s), z\right) \Pi(dz) ds = \int_0^t \int_{\mathbb{R}} \bar{f}(\xi(s), z) \Pi(dz) ds.$$

3 Main result

Let us consider the following representation of processes $x(t)$, $x'(t)$, $x''(t)$:

$$x(t) = C(t)e^{-at} + A_1(t) \cos(bt) + A_2(t) \sin(bt),$$

$$x'(t) = -aC(t)e^{-at} - bA_1(t) \sin(bt) + bA_2(t) \cos(bt),$$

$$x''(t) = a^2C(t)e^{-at} - b^2A_1(t) \cos(bt) - b^2A_2(t) \sin(bt),$$

$$N(t) = C(t) \exp\{-at\}.$$

Then

$$N(t) = \frac{b^2x(t) + x''(t)}{a^2 + b^2},$$

$$A_1(t) = \cos \alpha \cos(bt + \alpha)x(t) - \frac{\sin bt}{b}x'(t) - \frac{\sin \alpha \sin(bt + \alpha)}{b^2}x''(t),$$

$$A_2(t) = \cos \alpha \sin(bt + \alpha)x(t) + \frac{\cos bt}{b}x'(t) + \frac{\sin \alpha \cos(bt + \alpha)}{b^2}x''(t),$$

where $\alpha = \arctg(b/a)$. We can apply Ito formula [4] to stochastic process $\xi(t) = (N(t), A_1(t), A_2(t))$ and obtain for the process $\xi(t)$ the system of stochastic differential equations

$$dN(t) = -aN(t)dt + \frac{1}{a^2 + b^2}dH(t)$$

$$dA_1(t) = -\frac{\sin \alpha \sin(bt + \alpha)}{b^2}dH(t) \quad (3),$$

$$dA_2(t) = \frac{\sin \alpha \cos(bt + \alpha)}{b^2}dH(t)$$

$$N(0) = \frac{b^2x_0 + x''_0}{a^2 + b^2},$$

$$A_1(0) = \frac{a^2x_0 - x''_0}{a^2 + b^2},$$

$$A_2(0) = \frac{ax''_0 + (a^2 + b^2)x'_0 + ab^2x_0}{b(a^2 + b^2)},$$

where

$$\begin{aligned} dH(t) = & [\varepsilon^{k_0} \tilde{f}_0(t, N(t), A_1(t), A_2(t)) + \\ & + \varepsilon^{k_{m+1}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}_{m+1}(t, N(t), A_1(t), A_2(t), z) \Pi(dz)] dt + \\ & + \sum_{i=1}^m \varepsilon^{k_i} \tilde{f}_i(t, N(t), A_1(t), A_2(t)) dw_i(t) + \\ & + \varepsilon^{k_{m+1}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}_{m+1}(t, N(t), A_1(t), A_2(t), z) \tilde{\nu}(dt, dz), \end{aligned}$$

$\tilde{f}_i(t, N, A_1, A_2) = f_i(N + A_1 \cos bt + A_2 \sin bt, -aN - bA_1 \sin bt + bA_2 \cos bt, a^2N - b^2A_1 \cos bt - b^2A_2 \sin bt)$, $i = \overline{0, m}$, $\tilde{f}_{m+1}(t, N, A_1, A_2, z) = f_{m+1}(N + A_1 \cos bt + A_2 \sin bt, -aN - bA_1 \sin bt + bA_2 \cos bt, a^2N - b^2A_1 \cos bt - b^2A_2 \sin bt, z)$.

Theorem 3.1. *Let $\Pi(\mathbb{R}) < \infty$, $t \in [0, t_0]$, $k = \min(k_0, 2k_1, \dots, 2k_m, k_{m+1})$. Let us suppose, that functions f_i , $i = \overline{0, m+1}$ bounded and satisfy Lipschitz condition on x, x', x'' . If given below matrix $\bar{\sigma}^2(A_1, A_2)$ is non-negative definite, then*

1. For $k_0 = 2k_i = k_m + 1$, $i = \overline{1, m}$ the stochastic process $\xi_\varepsilon(t) = \xi(t/\varepsilon^k)$ weakly converges, as $\varepsilon \rightarrow 0$, to the stochastic process $\bar{\xi}(t) = (0, \bar{A}_1(t), \bar{A}_2(t))$, where $\bar{A}(t) =$

$(\bar{A}_1(t), \bar{A}_2(t))$ is the solution to the system of stochastic differential equations

$$\begin{aligned} d\bar{A}(t) &= \bar{\alpha}(\bar{A}(t))dt + \bar{\sigma}(\bar{A}(t))d\bar{w}(t), \\ \bar{A}(0) &= (A_1(0), A_2(0)), \end{aligned} \quad (4)$$

where $\bar{\alpha}(\bar{A}) = (\bar{\alpha}^{(1)}(A_1, A_2), \bar{\alpha}^{(2)}(A_1, A_2))$,

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}^{(1)}(A_1, A_2) &= -\frac{1}{2\pi b(a^2 + b^2)} \times \\ &\times \int_0^{2\pi} \hat{f}_{(1)}(\psi, A_1, A_2)(a \sin \psi + b \cos \psi) d\psi, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}^{(2)}(A_1, A_2) &= \frac{1}{2\pi b(a^2 + b^2)} \times \\ &\times \int_0^{2\pi} \hat{f}_{(1)}(\psi, A_1, A_2)(a \cos \psi - b \sin \psi) d\psi, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}(A_1, A_2) &= \{\bar{B}(A_1, A_2)\}^{\frac{1}{2}} = \\ &= \left\{ \frac{1}{2\pi b^2(a^2 + b^2)^2} \int_0^{2\pi} \hat{f}_{(2)}(\psi, A_1, A_2) B(\psi) d\psi \right\}^{\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B(\psi) &= (B_{ij}(\psi), i, j = 1, 2), \\ B_{11}(\psi) &= (a \sin \psi + b \cos \psi)^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_{12}(\psi) &= B_{21}(\psi) = \\ &= -(a \sin \psi + b \cos \psi)(a \cos \psi - b \sin \psi), \end{aligned}$$

$$B_{22}(\psi) = (a \cos \psi - b \sin \psi)^2,$$

$$\begin{aligned} \hat{f}_{(1)}(\psi, A_1, A_2) &= \tilde{f}_0(\psi, 0, A_1, A_2) + \\ &+ \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}_{m+1}(\psi, 0, A_1, A_2, z) \Pi(dz), \end{aligned}$$

$$\hat{f}_{(2)}(\psi, A_1, A_2) = \sum_{i=1}^m \tilde{f}_i^2(\psi, 0, A_1, A_2),$$

$\bar{w}(t) = (\bar{w}_i(t), i = 1, 2)$, $\bar{w}_i(t), i = 1, 2$ - independent one-dimensional Wiener processes.

2. If $k < k_0$ then in the averaging equation (4) we must put $\tilde{f}_0 \equiv 0$; if $k < 2k_j$ for some $1 \leq j \leq m$, then in the averaging equation (4) we must put $\tilde{f}_j \equiv 0$ for all such j ; if $k < k_{m+1}$ then in the averaging equation (4) we must put $\tilde{f}_{m+1} \equiv 0$.

Proof. Let us make a change of variable $t \rightarrow t/\varepsilon^k$ in equation (3) and obtain for the process $\xi_\varepsilon(t) = (N_\varepsilon(t), A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t)) = (N(t/\varepsilon^k), A_1(t/\varepsilon^k), A_2(t/\varepsilon^k))$ the system of stochastic differential equations

$$\begin{aligned} dN_\varepsilon(t) &= -\frac{a}{\varepsilon^k} N_\varepsilon(t) dt + \frac{1}{a^2 + b^2} dH_\varepsilon(t) \\ dA_1^\varepsilon(t) &= -\frac{\sin \alpha \sin(bt/\varepsilon^k + \alpha)}{b^2} dH_\varepsilon(t) \\ dA_2^\varepsilon(t) &= \frac{\sin \alpha \cos(bt/\varepsilon^k + \alpha)}{b^2} dH_\varepsilon(t), \end{aligned} \quad (5)$$

where

$$\begin{aligned} dH_\varepsilon(t) &= [\varepsilon^{k_0-k} \tilde{f}_0(t/\varepsilon^k, N_\varepsilon(t), A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t)) + \\ &+ \varepsilon^{k_{m+1}-k} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}_{m+1}(\frac{t}{\varepsilon^k}, N_\varepsilon(t), A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t), z) \Pi(dz)] dt \\ &+ \sum_{i=1}^m \varepsilon^{k_i-k/2} \tilde{f}_i(t/\varepsilon^k, N_\varepsilon(t), A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t)) dw_i^\varepsilon(t) + \\ &+ \varepsilon^{k_{m+1}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}_{m+1}(t/\varepsilon^k, N_\varepsilon(t), A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t), z) \tilde{\nu}_\varepsilon(dt, dz), \end{aligned}$$

$w_i^\varepsilon(t) = \varepsilon^{k/2} w_i(t/\varepsilon^k)$, $\tilde{\nu}_\varepsilon(t, A) = \nu(t/\varepsilon^k, A) - \Pi(A)t/\varepsilon^k$, here A is Borel set in $\mathbb{R}$. For any $\varepsilon > 0$ the processes $w_i^\varepsilon(t), i = \overline{1, m}$ are the independent Wiener processes and $\tilde{\nu}_\varepsilon(t, A)$ is the centered Poisson measure independent on $w_i^\varepsilon(t), i = \overline{1, m}$.

Since we have relationship $N_\varepsilon(t) = \exp\{-at/\varepsilon^k\} C(t/\varepsilon^k)$ and process $C_\varepsilon(t) = C(t/\varepsilon^k)$ satisfies the stochastic equation

$$C_\varepsilon(t) = C(0) + \int_0^t \frac{\exp\{as/\varepsilon^k\}}{a^2 + b^2} dH_\varepsilon(s),$$

where $C(0) = \frac{b^2 x_0 + x_0''}{a^2 + b^2}$, we can obtain estimate

$$\begin{aligned} \mathbf{E}|N_\varepsilon(t)|^2 &\leq K[e^{-2at/\varepsilon^k} + \varepsilon^k(1 - e^{-2at/\varepsilon^k}) \times \\ &\times (t(\varepsilon^{2(k_0-k)} + \varepsilon^{2(k_{m+1}-k)}) + \sum_{i=1}^{m+1} \varepsilon^{2k_i-k})]. \end{aligned}$$

Therefore $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathbf{E}|N_\varepsilon(t)|^2 = 0$ and it is sufficient to study the behaviour, as $\varepsilon \rightarrow 0$, of solution to the system of stochastic differential equations

$$\begin{aligned} dA_1^\varepsilon(t) &= -\frac{\sin \alpha \sin(bt/\varepsilon^k + \alpha)}{b^2} d\hat{H}_\varepsilon(t), \\ dA_2^\varepsilon(t) &= \frac{\sin \alpha \cos(bt/\varepsilon^k + \alpha)}{b^2} d\hat{H}_\varepsilon(t), \end{aligned} \quad (6)$$

with initial conditions $A_1^\varepsilon(0) = A_1(0), A_2^\varepsilon(0) = A_2(0)$, where

$$\begin{aligned} d\hat{H}_\varepsilon(t) &= [\varepsilon^{k_0-k} \hat{f}_0(t/\varepsilon^k, A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t)) + \\ &+ \varepsilon^{k_{m+1}-k} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}_{m+1}(\frac{t}{\varepsilon^k}, A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t), z) \Pi(dz)] dt \\ &+ \sum_{i=1}^m \varepsilon^{k_i-k/2} \hat{f}_i(t/\varepsilon^k, A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t)) dw_i^\varepsilon(t) + \\ &+ \varepsilon^{k_{m+1}} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}_{m+1}(t/\varepsilon^k, A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t), z) \tilde{\nu}_\varepsilon(dt, dz), \end{aligned}$$

$$\hat{f}_j(t, A_1, A_2) = \tilde{f}_j(t, 0, A_1, A_2), \quad j = \overline{0, m}$$

$$\hat{f}_{m+1}(t, A_1, A_2, z) = \tilde{f}_{m+1}(t, 0, A_1, A_2, z),$$

Let us denote $A_\varepsilon(t) = (A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t))$. Using conditions on coefficients of equation (6) and

properties of stochastic integrals we obtain estimates

$$\mathbb{E} \|A_\varepsilon(t)\|^2 \leq K[1 + t^2(\varepsilon^{2(k_1-k)} + \varepsilon^{2(k_{m+1}-k)}) + t \sum_{i=1}^{m+1} \varepsilon^{2k_i-k}],$$

$$\mathbb{E} \|A_\varepsilon(t) - A_\varepsilon(s)\|^2 \leq K[|t-s|^2(\varepsilon^{2(k_0-k)} + \varepsilon^{2(k_{m+1}-k)}) + |t-s| \sum_{i=1}^{m+1} \varepsilon^{2k_i-k}].$$

Similarly for the process $\zeta_\varepsilon(t) = (\zeta_1^\varepsilon(t), \zeta_2^\varepsilon(t))$, where

$$\begin{aligned} \zeta_1^\varepsilon(t) &= - \int_0^t \frac{\sin \alpha \sin(bs/\varepsilon^k + \alpha)}{b^2} dM_\varepsilon(s), \\ \zeta_2^\varepsilon(t) &= \int_0^t \frac{\sin \alpha \cos(bs/\varepsilon^k + \alpha)}{b^2} dM_\varepsilon(s), \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} dM_\varepsilon(t) &= \sum_{i=1}^m \varepsilon^{k_i-k/2} \hat{f}_i(t/\varepsilon^k, A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t)) dw_i^\varepsilon(t) + \\ &+ \varepsilon^{k_{m+1}} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}_{m+1}(t/\varepsilon^k, A_1^\varepsilon(t), A_2^\varepsilon(t), z) \tilde{\nu}_\varepsilon(dt, dz), \end{aligned}$$

we derive estimates

$$\mathbb{E} \|\zeta_\varepsilon(t)\|^2 \leq Kt \sum_{i=1}^{m+1} \varepsilon^{2k_i-k},$$

$$\mathbb{E} \|\zeta_\varepsilon(t) - \zeta_\varepsilon(s)\|^2 \leq K|t-s| \sum_{i=1}^{m+1} \varepsilon^{2k_i-k}.$$

Therefore for stochastic process $\eta_\varepsilon(t) = (A_\varepsilon(t), \zeta_\varepsilon(t))$ conditions of weak compactness [5] are fulfilled

$$\lim_{h \downarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sup_{|t-s| < h} \mathbb{P}\{|\eta_\varepsilon(t) - \eta_\varepsilon(s)| > \delta\} = 0$$

for any $\delta > 0$, $t, s \in [0, T]$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sup_{t \in [0, T]} \mathbb{P}\{|\eta_\varepsilon(t)| > N\} = 0,$$

and for any sequence $\varepsilon_n \rightarrow 0, n = 1, 2, \dots$ there exists a subsequence $\varepsilon_m = \varepsilon_{n(m)} \rightarrow 0, m = 1, 2, \dots$, probability space, stochastic processes $\bar{A}_{\varepsilon_m}(t) = (\bar{A}_1^{\varepsilon_m}(t), \bar{A}_2^{\varepsilon_m}(t))$, $\bar{\zeta}_{\varepsilon_m}(t)$, $\bar{A}(t) = (\bar{A}_1(t), \bar{A}_2(t))$, $\bar{\zeta}(t)$ defined on this space, such that $\bar{A}_{\varepsilon_m}(t) \rightarrow \bar{A}(t)$, $\bar{\zeta}_{\varepsilon_m}(t) \rightarrow \bar{\zeta}(t)$ in probability, as $\varepsilon_m \rightarrow 0$, and finite-dimensional distributions of $\bar{A}_{\varepsilon_m}(t), \bar{\zeta}_{\varepsilon_m}(t)$ are coincide with finite-dimensional distributions of $A_{\varepsilon_m}(t), \zeta_{\varepsilon_m}(t)$. Since we interesting in limit behaviour of distributions, we can

consider processes $A_{\varepsilon_m}(t)$, and $\zeta_{\varepsilon_m}(t)$ instead of $\bar{A}_{\varepsilon_m}(t), \bar{\zeta}_{\varepsilon_m}(t)$. From (6) we obtain equation

$$\begin{aligned} A_{\varepsilon_m}(t) &= A(0) + \int_0^t \alpha_{\varepsilon_m}(s, A_{\varepsilon_m}(s)) ds + \zeta_{\varepsilon_m}(t), \\ A_0 &= (A_1(0), A_2(0)), \end{aligned} \quad (7)$$

where $\alpha_\varepsilon(t, A) = (\alpha_\varepsilon^{(1)}(t, A_1, A_2), \alpha_\varepsilon^{(2)}(t, A_1, A_2))$,

$$\begin{aligned} \alpha_\varepsilon^{(1)}(t, A_1, A_2) &= \\ &= - \frac{\sin \alpha \sin(bt/\varepsilon^k + \alpha)}{b^2} \hat{f}_{(1)}^\varepsilon(t/\varepsilon^k, A_1, A_2), \\ \alpha_\varepsilon^{(2)}(t, A_1, A_2) &= \\ &= \frac{\sin \alpha \cos(bt/\varepsilon^k + \alpha)}{b^2} \hat{f}_{(1)}^\varepsilon(t/\varepsilon^k, A_1, A_2), \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} \hat{f}_{(1)}^\varepsilon(t, A_1, A_2) &= \varepsilon^{k_0-k} \hat{f}_0(t, A_1, A_2) + \\ &+ \varepsilon^{k_{m+1}-k} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}_{m+1}(t, A_1, A_2, z) \Pi(dz). \end{aligned}$$

It should be noted that process $\zeta_\varepsilon(t)$ is the vector-valued square integrable martingale with matrix characteristic

$$\begin{aligned} \langle \zeta_\varepsilon^{(l)}, \zeta_\varepsilon^{(n)} \rangle(t) &= \sum_{j=1}^m \int_0^t \sigma_\varepsilon^{(l,j)}(s, A_1^\varepsilon(s), A_2^\varepsilon(s)) \times \\ &\times \sigma_\varepsilon^{(n,j)}(s, A_1^\varepsilon(s), A_2^\varepsilon(s)) ds + \\ &+ \frac{1}{\varepsilon^k} \int_0^t \int_{\mathbb{R}} \gamma_\varepsilon^{(l)}(s, A_1^\varepsilon(s), A_2^\varepsilon(s), z) \times \\ &\times \gamma_\varepsilon^{(n)}(s, A_1^\varepsilon(s), A_2^\varepsilon(s), z) \Pi(dz) ds, \quad l, n = 1, 2, \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} \sigma_\varepsilon^{(1,j)}(s, A_1, A_2) &= \\ &= -\varepsilon^{k_j-k/2} \frac{\sin \alpha \sin(\frac{bs}{\varepsilon^k} + \alpha)}{b^2} \hat{f}_j(\frac{s}{\varepsilon^k}, A_1, A_2), \\ \sigma_\varepsilon^{(2,j)}(s, A_1, A_2) &= \\ &= \varepsilon^{k_j-k/2} \frac{\sin \alpha \cos(\frac{bs}{\varepsilon^k} + \alpha)}{b^2} \hat{f}_j(\frac{s}{\varepsilon^k}, A_1, A_2), \\ \gamma_\varepsilon^{(1)}(s, A_1, A_2, z) &= \\ &= -\varepsilon^{k_{m+1}} \frac{\sin \alpha \sin(\frac{bs}{\varepsilon^k} + \alpha)}{b^2} \hat{f}_{m+1}(\frac{s}{\varepsilon^k}, A_1, A_2, z), \\ \gamma_\varepsilon^{(2)}(s, A_1, A_2, z) &= \\ &= \varepsilon^{k_{m+1}} \frac{\sin \alpha \cos(\frac{bs}{\varepsilon^k} + \alpha)}{b^2} \hat{f}_{m+1}(\frac{s}{\varepsilon^k}, A_1, A_2, z). \end{aligned}$$

For processes $A_\varepsilon(t)$ and $\zeta_\varepsilon(t)$ following estimates hold

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \|A_\varepsilon(t) - A_\varepsilon(s)\|^4 &\leq \\ &\leq K[(\varepsilon^{4(k_0-k)} + \varepsilon^{4(k_{m+1}-k)})|t-s|^4 + \\ &+ \mathbb{E} \|\zeta_\varepsilon(t) - \zeta_\varepsilon(s)\|^4], \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \|\zeta_\varepsilon(t) - \zeta_\varepsilon(s)\|^4 &\leq \\ &\leq K[\sum_{j=1}^{m+1} \varepsilon^{4k_j-2k}|t-s|^2 + \\ &+ \varepsilon^{4k_{m+1}-3k/2}|t-s|^{3/2} + \varepsilon^{4k_{m+1}-k}|t-s|], \end{aligned} \quad (9)$$

$$\mathbb{E} \|A_\varepsilon(t) - A_\varepsilon(s)\|^8 \leq K, \mathbb{E} \|\zeta_\varepsilon(t) - \zeta_\varepsilon(s)\|^8 \leq K. \quad (10)$$

Since $A_{\varepsilon_m}(t) \rightarrow \bar{A}(t)$, $\zeta_{\varepsilon_m}(t) \rightarrow \bar{\zeta}(t)$ in probability, as $\varepsilon_m \rightarrow 0$, then, using (10), from (8) and (9) we obtain estimates

$$\mathbb{E} \|\bar{A}(t) - \bar{A}(s)\|^4 \leq K(|t-s|^4 + |t-s|^2), \\ \mathbb{E} \|\bar{\zeta}(t) - \bar{\zeta}(s)\|^4 \leq C|t-s|^2.$$

Therefore processes $\bar{A}(t)$ and $\bar{\zeta}(t)$ satisfy the Kolmogorov's continuity condition.

Let us consider the case $k_0 = 2k_j = k_{m+1}$, $j = \overline{1, m}$. Under these conditions we have for $l, n = 1, 2$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{t} \int_0^t \alpha_\varepsilon^{(l)}(s, A_1, A_2) ds = \bar{\alpha}^{(l)}(A_1, A_2), \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{t} \int_0^t \left[\sum_{j=1}^m \sigma_\varepsilon^{(l,j)}(s, A_1, A_2) \sigma_\varepsilon^{(n,j)}(s, A_1, A_2) + \right. \\ \left. + \frac{1}{\varepsilon^k} \int_R \gamma_\varepsilon^{(l)}(s, A_1, A_2, z) \times \right. \\ \left. \times \gamma_\varepsilon^{(n)}(s, A_1, A_2, z) \Pi(dz) \right] ds = \bar{B}_{ln}(A_1, A_2), \quad (11)$$

where functions $\bar{\alpha}^{(i)}(A_1, A_2)$ and $\bar{B}(A_1, A_2) = \{\bar{B}_{ij}(A_1, A_2), i, j = 1, 2\}$ are defined in the condition of theorem. Since processes $\bar{A}(t), \bar{\zeta}(t)$ are continuous, then from Lemma 1 and relationships (7), (11) it follows

$$\bar{A}(t) = A(0) + \int_0^t \bar{\alpha}(\bar{A}_1(s), \bar{A}_2(s)) ds + \bar{\zeta}(t), \\ A(0) = (A_1(0), A_2(0)), \quad (12)$$

where $\bar{\zeta}(t)$ is continuous vector-valued martingale with matrix characteristic

$$\langle \bar{\zeta}^{(i)}, \bar{\zeta}^{(j)} \rangle(t) = \int_0^t \bar{B}_{ij}(\bar{A}_1(s), \bar{A}_2(s)) ds, i, j = 1, 2.$$

Hence [6] there exists Wiener process $\bar{w}(t) = (w_i(t), i = 1, 2)$, such that

$$\bar{\zeta}(t) = \int_0^t \bar{\sigma}(\bar{A}_1(s), \bar{A}_2(s)) d\bar{w}(s), \quad (13) \\ \bar{\sigma}(A_1, A_2) = \{\bar{B}(A_1, A_2)\}^{1/2}.$$

Relationships (12), (13) mean that process $\bar{A}(t)$ satisfies equation (4). Under conditions of theorem the equation (4) has unique solution. Therefore process $\bar{A}(t)$ does not depend on choosing of

sub-sequence $\varepsilon_m \rightarrow 0$, and finite-dimensional distributions of process $A_{\varepsilon_m}(t)$ converge to finite-dimensional distributions of process $\bar{A}(t)$. Since processes $A_{\varepsilon_m}(t)$ and $\bar{A}(t)$ are Markov processes then using the conditions for weak convergence of Markov processes we finish the proof of statement 1 of theorem.

Let us consider the case $k < k_0$ or $k < k_{m+1}$. Then the corresponding terms in the coefficients $\alpha_\varepsilon^{(i)}(t, A_1, A_2)$, $i = 1, 2$ of equation (7) tend to zero, as $\varepsilon \rightarrow 0$.

In the case $k < 2k_j$, $j = \overline{1, m}$ in (11) we have

$$\sigma_\varepsilon^{(l,j)}(t, A_1, A_2) \sigma_\varepsilon^{(n,j)}(t, A_1, A_2) = O(\varepsilon^{2k_j-k}), \\ l, n = 1, 2.$$

Repeating with obvious modifications the proof of statement 1) of theorem we obtain proof of the statement 2). $\square$

References

1. Krylov N.M., Bogolyubov N.N., *Introduction to non-linear mechanics*// Kyiv: Publ.Acad.Sci. UkrSSR. – 1937.
2. Borysenko O.D., Borysenko O.V. *Limit behavior of autonomous random oscillating system of third order*// Theory of Stoch. Proc. – 2007. – Vol.13(29). – №4. – P. 19 – 28.
3. Borysenko O.D., Malyshev I.G., *The limit behaviour of integral functional of the solution of stochastic differential equation depending on small parameter*// Theory of Stoch. Proc. – 2001. – Vol.7(23). – №1-2. – P. 30 – 36.
4. Gikhman, I.I., Skorokhod, A.V., *Stochastic Differential Equations*// Springer-Verlag, Berlin. – 1972.
5. Skorokhod, A.V., *Studies in the Theory of Random Processes*// Addison-Wesley. – 1965.
6. Ikeda, N. and Watanabe, S., *Stochastic Differential Equations and Diffusion Processes*// North Holland, Amsterdam and Kadansha, Tokyo. – 1981.

Received: 18.03.2013

УДК 519.2

О.Г. Ганюшкін¹, к.ф.-м.н., доцент
О.О. Десятерик², аспірант

Варіанти напіврешіток

Для скінченної нижньої напіврешітки, яка розглядається як напівгрупа відносно взяття точної нижньої грані двох елементів, встановлено критерій ізоморфності двох варіантів. Потім цей критерій використовується для опису варіантів скінченного ланцюга, булеану скінченної множини, решітки розбиттів скінченної множини і решітки підпросторів скінченного простору.

Ключові слова: варіант, напіврешітка, сендвіч операція.

^{1,2}Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Володимирська, 64.

E-mail: ²narenai@yandex.ru

Introduction

Let S be a semigroup and $a \in S$. For $x, y \in S$ let $x *_a y = xay$, then $*_a$ is an associative binary operation on S . The operation $*_a$ is usually called the sandwich-operation. The semigroup $(S, *_a)$ is called the variant of S , or, alternatively, the sandwich semigroup of S with respect to the sandwich element a .

The task of researching variants of semigroups was first raised in Liapin's famous monograph [1]. Although initially Liapin formulated problem only for semigroups of transformations, soon different authors began to explore options for many other classes of semigroups (see for example, [2] [3] [4] [5], and chapter 13 of the monograph [6] with the literature listed there).

In this paper, we study variants of a finite lower semilattice that is considered as a semigroup under the operation of taking of the infimum of two elements.

The main result of this paper is Theorem 1, which is establishing a criterion of isomorphism of two variants for such semigroups. Then this criterion is used to describe variants of several classical lattices.

O.G. Ganyushkin¹, docent
O.O. Desiateryk², Postgraduate

Variants of a semilattice

In the paper there is obtained a criterion of isomorphism for two variants of a finite lower semilattice, which is considered as a semigroup under the operation of taking of the infimum (i.e. a greatest lower bound). Then this criterion is being used to describe variants of a finite chain, the powerset of a finite set, the lattice of partitions of a finite set, and the lattice of subspaces of a finite space.

Key Words: variant, semilattice, sandwich-operation.

^{1,2}National Taras Shevchenko University of Kyiv, 01033, Kyiv, 64 Volodymyrska st.

1 Isomorphism of variants criterion

Let $(L, \leq)$ be a finite lower semilattice with zero 0, $a \in L$. The semigroup $(S, *_a)$ with the operation $x *_a y = x \wedge a \wedge y$ is said to be the variant of semilattice L with the sandwich element a .

For each element $x \in [0, a]$ define weight $\omega(x) = |\{y \in L \mid a \wedge y = x\}|$.

Theorem 1 (Criterion of isomorphism of variants of lower semilattice). *Two variants $(L, *_a)$ and $(L, *_b)$ of semilattice L are isomorphic if and only if there exist an isomorphism from the interval $[0, a]$ to the interval $[0, b]$ which saves the weights of all elements.*

Proof. Necessity. Let variants $(L, *_a)$ and $(L, *_b)$ be isomorphic, and

$$\varphi : (L, *_a) \rightarrow (L, *_b) \quad \text{and} \quad \psi : (L, *_b) \rightarrow (L, *_a)$$

be mutually inverse isomorphisms. Then the following relations hold:

$$\begin{aligned} \varphi(x \wedge a \wedge y) &= \varphi(x) \wedge b \wedge \varphi(y), \quad \text{and} \\ \psi(x \wedge b \wedge y) &= \psi(x) \wedge a \wedge \psi(y). \end{aligned} \quad (1)$$

When $x = y = a$, the first of these relations turns into equality $\varphi(a \wedge a \wedge a) = \varphi(a) \wedge b \wedge \varphi(a)$, which implies $\varphi(a) = \varphi(a) \wedge b$. Hence, $\varphi(a) \leq b$.

Similarly, when $x = y = a$, from the second relation from (1) we get that $\psi(b) = \psi(b) \wedge a$ and $\psi(b) \leq a$.

Applying the isomorphism φ to both parts of the equality $\psi(b) = \psi(b) \wedge a$, we obtain:

$$b = \varphi(\psi(b)) = \varphi(\psi(b) \wedge a) = \varphi(\psi(b) \wedge a \wedge a) = \\ = \varphi(\psi(b)) \wedge b \wedge \varphi(a) = b \wedge b \wedge \varphi(a) = b \wedge \varphi(a).$$

Hence, $b \leq \varphi(a)$. Then, taking into account an inequality $\varphi(a) \leq b$, it follows that $b = \varphi(a)$. Since isomorphisms φ and ψ are mutually inverse, we also get $a = \psi(b)$.

Now we'll prove that the isomorphism φ maps each element from the interval $[0, a]$ into an element from the interval $[0, b]$. Indeed, let $x \in [0, a]$. Then $x = x \wedge a$. Applying isomorphism φ to both parts of this equality, we get:

$$\varphi(x) = \varphi(x \wedge a) = \varphi(x \wedge a \wedge x) = \varphi(x *_a x) = \\ = \varphi(x) *_b \varphi(x) = \varphi(x) \wedge b \wedge \varphi(x) = \varphi(x) \wedge b.$$

It proves that $\varphi(x) \leq b$, thus $\varphi(x) \in [0, b]$.

If $x, y \in [0, a]$, then $x \wedge a \wedge y = x \wedge y$. Furthermore, in this case $\varphi(x), \varphi(y) \in [0, b]$, therefore $\varphi(x) \wedge b \wedge \varphi(y) = \varphi(x) \wedge \varphi(y)$. But then if $x, y \in [0, a]$, the first relation from (1) gives us equality $\varphi(x \wedge y) = \varphi(x) \wedge \varphi(y)$. Thus the restriction $\tilde{\varphi}$ of isomorphism φ to interval $[0, a]$ is a homomorphism from the partially ordered set $[0, a]$ to the partially ordered set $[0, b]$. Since for $\tilde{\varphi}$ there exists a mutually inverse homomorphism ψ induced by the mapping ψ , $\tilde{\varphi}$ is an isomorphism of intervals $[0, a]$ and $[0, b]$.

It is left to prove that isomorphism $\tilde{\varphi}$ saves the weights of all elements. Fix an element $x \in [0, a]$ and consider an arbitrary element $y \in L$ such that the equality $y \wedge a = x$ holds. Then

$$\tilde{\varphi}(x) = \varphi(x) = \varphi(y \wedge a) = \varphi(y \wedge a \wedge a) = \\ = \varphi(y *_a a) = \varphi(y) *_b \varphi(a) = \\ = \varphi(y) \wedge b \wedge b = \varphi(y) \wedge b.$$

Therefore, the isomorphism φ maps every element of set $\Omega(x) = \{y \in L \mid a \wedge y = x\}$ into an element of set $\Omega(\tilde{\varphi}(x)) = \{z \in L \mid z \wedge b = \tilde{\varphi}(x)\}$. Similarly we check that inverse isomorphism ψ maps the set $\Omega(\tilde{\varphi}(x))$ into the set $\Omega(x)$. But then $|\Omega(\tilde{\varphi}(x))| = |\Omega(x)|$, i.e. $\omega(\tilde{\varphi}(x)) = \omega(x)$.

Sufficiency. Let $\tilde{\varphi}$ be an isomorphism from interval $[0, a]$ to interval $[0, b]$, which saves the

weights of elements. We'll show that it can be expanded to an isomorphism $\varphi : (L, *_a) \rightarrow (L, *_b)$ of the corresponding variants.

For each element $x \in [0, a]$ consider the set $\Omega(x) = \{y \in L \mid a \wedge y = x\}$. The sets $\Omega(x)$, $x \in [0, a]$ are generating a partition of semilattice L . Indeed, since for any $y \in L$ we have $a \wedge y \in [0, a]$, then $\bigcup_{x \in [0, a]} \Omega(x) = L$. On the other hand, sets $\Omega(x)$

are pairwise disjoint, because for any $x_1, x_2 \in [0, a]$ $y \in \Omega(x_1) \cap \Omega(x_2)$ implies $x_1 = a \wedge y = x_2$. Similarly one can show that sets $\Omega(\tilde{\varphi}(x))$, $x \in [0, a]$ are also generating a partition of semilattice L .

The fact that isomorphism $\tilde{\varphi}$ saves the weights of elements implies that for each $x \in [0, a]$ sets $\Omega(x)$ and $\Omega(\tilde{\varphi}(x))$ have the same cardinality. For each element $x \in [0, a]$ fix an arbitrary bijection $\psi'_x : (\Omega(x) \setminus \{x\}) \rightarrow (\Omega(\tilde{\varphi}(x)) \setminus \{\tilde{\varphi}(x)\})$ and expand it to bijection $\psi_x : \Omega(x) \rightarrow \Omega(\tilde{\varphi}(x))$, putting $\psi_x = \tilde{\varphi}(x)$. Consider mapping

$$\varphi : (L, *_a) \rightarrow (L, *_b), \quad \text{where } \varphi(z) = \psi_x(z), \\ \text{if } z \in \Omega(x) \setminus \{x\}. \quad (2)$$

Obviously, the mapping φ is a bijection. To complete the proof it suffices to show that φ is a homomorphism of semigroups. Take any two elements $u \in \Omega(x)$, $v \in \Omega(y)$. Then element

$$u *_a v = u \wedge a \wedge v = u \wedge a \wedge a \wedge v = x \wedge y$$

belongs to the interval $[0, a]$, therefore $\varphi(u *_a v) = \tilde{\varphi}(x \wedge y)$. On the other hand, for the elements u and v we have:

$$\varphi(u) *_b \varphi(v) = \varphi(u) \wedge b \wedge \varphi(v) = \\ = \varphi(u) \wedge b \wedge b \wedge \varphi(v) = \tilde{\varphi}(x) \wedge \tilde{\varphi}(y).$$

But $\tilde{\varphi}$ is an isomorphism from $[0, a]$ to $[0, b]$, so $\tilde{\varphi}(x \wedge y) = \tilde{\varphi}(x) \wedge \tilde{\varphi}(y)$. Thus $\varphi(u *_a v) = \varphi(u) *_b \varphi(v)$ and this completes the proof of the theorem.

2 Variants of some lattices

Consider the applications of theorem 1 to some classical lattices.

1. Finite chain.

Proposition 1. *All variants of a finite chain are pairwise non-isomorphic.*

Proof. If a and b are two different elements of a finite chain L , then one of the intervals $[0, a]$ and $[0, b]$ is strictly contained in another. Therefore they have different cardinality and are not isomorphic. From the theorem 1 it immediately follows that the variants $(L, *_{a_1})$ and $(L, *_{a_2})$ are also not isomorphic.

Corollary 1. *Number of pairwise non-isomorphic variants of a chain with length n is equal to $n + 1$.*

2. Power set of a finite set.

The set $\mathfrak{B}_n$ of all subsets of the set $\{1, 2, \dots, n\}$ (i.e. set $\mathfrak{B}_n$, ordered by inclusion) called power set of a finite set.

Proposition 2. *Let A and B be two elements of the power set $\mathfrak{B}_n$. Variants $(\mathfrak{B}_n, *_{A_1})$ and $(\mathfrak{B}_n, *_{A_2})$ are isomorphic if and only if sets A and B have the same cardinality.*

Proof. If the set $A \in \mathfrak{B}_n$ has the form $A = \{a_1, \dots, a_k\}$, then interval $[\emptyset, A]$ is isomorphic to the power set $\mathfrak{B}_k$ and has 2^k elements. Let now $X = \{a_{i_1}, \dots, a_{i_m}\}$ be any element from $[\emptyset, A]$. Set $Y \in \mathfrak{B}_n$ satisfies equality $Y \cap A = X$ if and only if it has the form $Y = X \cup Z$, where $Z \in \mathfrak{B}_n \setminus A$.

So the weight $\omega(X)$ of element X is equal to 2^{n-k} . Therefore all the elements of interval $[\emptyset, A]$ have the same weight, which is fully determined by the cardinality of the set A .

Thus intervals $[\emptyset, A]$ and $[\emptyset, B]$ are isomorphic if and only if $|A| = |B|$. Moreover, any isomorphism between these intervals saves the weights. Reference to the theorem 1 ends the proof of the statement.

Corollary 2. *The number of non-isomorphic variants of power set $\mathfrak{B}_n$ is equal to $n + 1$.*

Proof. This follows from the proposition 2 together with the fact that cardinality of the set $A \in \mathfrak{B}_n$ may change from 0 to n .

3. Lattice of subspaces of a finite dimensional vector space.

Let $\mathcal{L}(n, q)$ be the lattice of subspaces of the n -dimensional vector space $\mathbb{F}_q^n$ over the finite field $\mathbb{F}_q$ of dimension q , ordered by inclusion.

Proposition 3. *Variants $(\mathcal{L}(n, q), *_{U_1})$ and $(\mathcal{L}(n, q), *_{U_2})$ of lattice $\mathcal{L}(n, q)$ are isomorphic if and only if subspaces U and W have the same dimension.*

Proof. Let $\mathbb{F}_q^n \supseteq U \supseteq X$, and let subspaces U and X have dimensions m and k respectively. Then subspace $Y \subseteq \mathbb{F}_q^n$ satisfies condition $Y \cap U = X$ if and only if quotient space Y/X will have a zero crossing with $(m - k)$ -dimensional quotient space U/X in $(n - k)$ -dimensional quotient space $\mathbb{F}_q^n/X$. Then quotient spaces U/X and Y/X have a zero crossing if and only if the union of their bases is a linearly independent system. Fixed base $e_1, \dots, e_{m-k}$ of quotient space U/X can be extended to a linearly independent system by $e_1, \dots, e_{m-k}, v_{m-k+1}, \dots, v_{m-k+i}$

$$(q^{n-k} - q^{m-k})(q^{n-k} - q^{m-k+1}) \dots (q^{n-k} - q^{m-k+i-1})$$

ways, and $(q^i - 1)(q^i - q) \dots (q^i - q^{i-1})$ different sets $v_{m-k+1}, \dots, v_{m-k+i}$ will generate the same i -dimensional space Y/X . Therefore the total number of subspaces Y that satisfy the condition $Y \cap U = X$, is equal to

$$\sum_{i=0}^{n-m} \frac{(q^{n-k} - q^{m-k})(q^{n-k} - q^{m-k+1}) \dots}{(q^i - 1)(q^i - q) \dots (q^i - q^{i-1})} \times$$

$$\frac{\dots (q^{n-k} - q^{m-k+i-1})}{(q^i - 1)(q^i - q) \dots (q^i - q^{i-1})}. \quad (3)$$

Thus the weight of the element X from interval $[0, U]$, which is given by expression (3), depends only on the dimensions of the subspaces U and X .

Interval $[0, U]$ of the lattice $\mathcal{L}(n, q)$ is isomorphic to the lattice $\mathcal{L}(n, \dim U)$. Therefore intervals $[0, U]$ and $[0, W]$ are isomorphic if and only if $\dim U = \dim W$. But if $\dim U = \dim W$ then subspaces U and W are isomorphic, and each isomorphism from U to W induces an isomorphism from $[0, U]$ to $[0, W]$ which save dimensions of subspaces and their weights. Therefore, according to the theorem 1, variants $(\mathcal{L}(n, q), *_{U_1})$ and $(\mathcal{L}(n, q), *_{U_2})$ are isomorphic if and only if $\dim U = \dim W$.

Corollary 3. *The number of non-isomorphic variants of lattice $\mathcal{L}(n, q)$ is equal to $n + 1$.*

4. The lattice of partitions of a finite set.

Let Part_n be lattice of all partitions of a set $\{1, 2, \dots, n\}$, and partition ρ is said to be less than partition τ if and only if each block of the partition ρ is contained in one of the blocks of the partition τ . Partition τ has type $\langle l_1, l_2, \dots, l_n \rangle$ (or

$1^{l_1} 2^{l_2} \dots n^{l_n}$) if it contains l_1 blocks of length 1, l_2 blocks of length 2, $\dots$, l_n blocks of length n . It is clear that $l_1 + 2l_2 + \dots + nl_n = n$.

We need several lemmas, proofs of which are obvious.

Lemma 1. *Partition ρ is coatom of lattice Part_n if and only if it is a two-blocks partition. In particular, lattice Part_n has exactly $2^{n-1} - 1$ coatoms.*

Lemma 2. *Let ρ be a partition of the set $\{1, 2, \dots, n\}$ into blocks $M_1, \dots, M_k$ of cardinalities $m_1, \dots, m_k$, respectively. Then the interval $[0, \rho]$ is isomorphic to the Cartesian product $\text{Part}_{m_1} \times \dots \times \text{Part}_{m_k}$.*

Denote the number of coatoms of the lattice L by $\kappa(L)$.

Lemma 3. *If a finite lattice L is the Cartesian product $L = L_1 \times \dots \times L_m$ of lattices $L_1, \dots, L_m$, then element $b \in L$ is coatom if and only if it has a form $b = (1_1, \dots, 1_{i-1}, b_i, 1_{i+1}, \dots, 1_m)$, where 1_j is a unit of lattice L_j , and b_i is a coatom of lattice L_i . In particular, $\kappa(L) = \kappa(L_1) + \dots + \kappa(L_m)$.*

Theorem 2. *Variants $(\text{Part}_n, *_\rho)$ and $(\text{Part}_n, *_\tau)$ of lattice Part_n are isomorphic if and only if partitions ρ and τ have the same type.*

Proof. First, we'll prove that intervals $[0, \rho]$ and $[0, \tau]$ are isomorphic if and only if partitions ρ and τ have the same type. The sufficiency of the condition is obvious; we will prove necessity by induction on the power of the interval. The statement is obvious if cardinality of interval is equal to 1 or 2. It gives the base for the induction.

Let intervals $[0, \rho]$ and $[0, \tau]$ be isomorphic and assume that the statement is already proved for intervals of all smaller dimensions. Then we can choose coatoms $\mu \in [0, \rho]$ and $\nu \in [0, \tau]$ such that the intervals $[0, \mu]$ and $[0, \nu]$ are also isomorphic. By the lemma 2 this intervals have the following form:

$$[0, \mu] \simeq \text{Part}_{m_1} \times \dots \times \text{Part}_{m_p}, \\ [0, \nu] \simeq \text{Part}_{n_1} \times \dots \times \text{Part}_{n_q}. \quad (4)$$

By induction assumption, partitions μ and ν must have the same type so $p = q$ and after renumbering of factors we may assume that $m_1 = n_1, \dots, m_p = n_p$. By the lemma 2, partition ρ is formed by joining two blocks of partition μ into one, and partition τ is formed by joining two blocks of partition ν into one.

Without loss of generality we can assume that one of two cases holds:

$$\text{I. } \rho \simeq \text{Part}_{m+k} \times \text{Part}_l \times \text{Part}_{m_4} \times \dots \\ \dots \times \text{Part}_{m_p}, \\ \tau \simeq \text{Part}_{m+l} \times \text{Part}_k \times \text{Part}_{m_4} \times \dots \\ \dots \times \text{Part}_{m_p};$$

$$\text{II. } \rho \simeq \text{Part}_{m+r} \times \text{Part}_k \times \text{Part}_l \times \text{Part}_{m_5} \times \\ \dots \times \text{Part}_{m_p}, \\ \tau \simeq \text{Part}_{k+l} \times \text{Part}_m \times \text{Part}_r \times \text{Part}_{m_4} \times \\ \dots \times \text{Part}_{m_p}.$$

Consider the first case. Without loss of generality we can assume that $k \geq l$.

Since the intervals $[0, \mu]$ and $[0, \nu]$ are isomorphic, they contain the same number of coatoms. From the lemma 3, it follows that the number of coatoms of interval $[0, \rho]$, nonunit part of which lies in $\text{Part}_{m+k} \times \text{Part}_l$, must be equal to the number of coatoms of the interval $[0, \tau]$, nonunit part of which lies in $\text{Part}_{m+l} \times \text{Part}_k$, and this numbers are equal to

$$(2^{m+k-1} - 1) + (2^{l-1} - 1) \quad \text{and}$$

$$(2^{m+l-1} - 1) + (2^{k-1} - 1),$$

respectively. Hence

$$2^{m+k} + 2^l = 2^{m+l} + 2^k. \quad (5)$$

If $m + l > k$ it leads to the equality

$$2^l(2^{m+k-l} + 1) = 2^k(2^{m+l-k} + 1),$$

and $m + k - l > 0$ i $m + l - k > 0$. Then $l = k$, and partitions ρ and τ have the same type.

Inequality $m + l \leq k$ is not possible because then number 2 will be included with the exponent l in decomposition of the left part of the equality (5), and with the exponent at least $m + l$ in decomposition of the right part.

Thus in the first case partitions ρ and τ have the same type.

Now consider the second case. Similarly to the case I from the counting coatoms in intervals $[0, \rho]$ and $[0, \tau]$ we obtain the equality

$$2^{m+r} + 2^k + 2^l = 2^{k+l} + 2^m + 2^r. \quad (6)$$

Count the number of atoms in each of the intervals $[0, \rho]$ and $[0, \tau]$. Obviously, the partition is atom if and only if all its blocks have exactly one

element, except the one block which contains two elements. And both elements of this block must belong to the same block of the partition ρ (for the interval $[0, \rho]$) or partition τ (for the interval $[0, \tau]$). It gives equality

$$\binom{m+r}{2} + \binom{k}{2} + \binom{l}{2} = \binom{k+l}{2} + \binom{m}{2} + \binom{r}{2}.$$

Hence we obtain:

$$mr = kl. \quad (7)$$

Without loss of generality, we can assume that $m \geq r$ i $k \geq l$. If $m = k$ then $r = l$ and partitions ρ and τ have the same type. Suppose now that $m \neq k$. We can assume that $m > k$. Then (7) implies $r < l$.

If $k = l$ then (7) implies that $r < k$. Now from equality (6) we obtain:

$$2^{k+1}(2^{m+r-k-1} + 1) = 2^r(2^{2k-r} + 2^{m-r} + 1),$$

and $m + r - k - 1 > 0$, $2k - r > 0$, $m - r > 0$. Therefore $k + 1 = r$, which contradicts with the inequality $r < k$. Hence the case $k = l$ is impossible.

It is left to consider the case $m > k > l > r$. In this case equality (6) can be rewritten as

$$2^l(2^{m+r-l} + 2^{k-l} + 1) = 2^r(2^{k+l-r} + 2^{m-r} + 1),$$

and $m + r - l > 0$, $k - l > 0$, $2^{k+l-r} > 0$, $m - r > 0$. But then $l = r$ which again leads to a contradiction.

Thus in all cases the assumption that $m \neq k$ leads to a contradiction. Hence, intervals $[0, \rho]$ and $[0, \tau]$ are isomorphic if and only if the partitions ρ and τ have the same type.

Now let partitions

$$\rho = a_1 \dots a_k | b_1 \dots b_l | \dots | d_1 \dots d_m \quad \text{and}$$

$$\tau = a'_1 \dots a'_k | b'_1 \dots b'_l | \dots | d'_1 \dots d'_m$$

have the same type. Consider the permutation

$$\pi = \begin{pmatrix} a_1 & \dots & a_k & b_1 & \dots & b_l & \dots & d_1 & \dots & d_m \\ a'_1 & \dots & a'_k & b'_1 & \dots & b'_l & \dots & d'_1 & \dots & d'_m \end{pmatrix}.$$

Then mapping $\varphi_\pi : \text{Part}_n \rightarrow \text{Part}_n$, which sends a partition $x_1 \dots x_p | \dots | y_1 \dots y_q$ into partition $\pi(x_1) \dots \pi(x_p) | \dots | \pi(y_1) \dots \pi(y_q)$, is an automorphism of lattice Part_n which maps the interval $[0, \rho]$ into the interval $[0, \tau]$. Since in this case expression $\delta \wedge \rho = \mu$ go into expression $\varphi_\pi(\delta) \wedge \varphi_\pi(\rho) = \varphi_\pi(\mu)$, the restriction of the automorphism φ_π on interval $[0, \rho]$ save the weights of elements. From the theorem 1 now follows that variants $(\text{Part}_n, *_\rho)$ and $(\text{Part}_n, *_\tau)$ are isomorphic.

Corollary 4. *Lattice Part_n has exactly $p(n)$ pairwise non-isomorphic variants, where $p(n)$ is the number of unordered partitions of number n into the sum of natural summands.*

Proof. The statement follows from theorem 2 and the fact that if we put in the corresponding to partition ρ the sum of power of it blocks, we will obtain a one-to-one correspondence between the types of partition of the set $\{1, 2, \dots, n\}$ and partitions of number n in the sum of natural summands.

3 Conclusions

We obtained a criterion of isomorphism for two variants of a finite lower semilattice, which is considered as a semigroup under the operation of taking of the infimum. We have applied this criterion to describe variants of a few classical semilattices such as: a finite chain, the powerset of a finite set, the lattice of partitions of a finite set, and the lattice of subspaces of a finite space.

References

1. *Liapin E.* Semigroups. Moscow, 1960. (in Russian)
2. *Chase K.* Sandwich semigroups of binary relations. // Discrete Math. — 1979. — V. **28(3)**. — P. 231–236.
3. *Hickey J.* Semigroups under a sandwich operation. // Proc. Edinburg Math. Soc. (2) — 1983. — V. **26(3)**. — P. 371–382.
4. *Khan T., Lawson M.* Variants of regular semigroups. // Semigroup Forum. — 2001. — V. **62(3)**. — P. 358–374.
5. *Mazorchuk V., Tsyaputa G.* Isolated subsemigroups in the variants of $\mathcal{Y}_n$. // Acta Math. Univ. Com. — 2008. — V. LXXVII, **1**. — P. 63–84.
6. *Ganyushkin O., Mazorchuk V.* Classical Finite Transformation Semigroups. An Introduction. Algebra and Applications, **9**, Springer–Verlag, London, 2009.

Received: 10.04.2013

УДК 512.53

Є.А. Кочубінська¹, к. ф.-м. н., асистент

**Про комбінаторику часткового
вінцевого добутку скінченних
симетричних інверсних напівгруп.**

У статті зібрано деякі комбінаторні результати (наприклад, потужність напівгруп, комбінаторика відношень Гріна та нільпотентних елементів), що стосуються вінцевого добутку скінченних інверсних напівгруп. Через рекурсивне визначення вінцевого добутку виникають рекурентні формули, в які входять різноманітні відомі комбінаторні об'єкти.

Ключові слова: інверсна симетрична напівгрупа, відношення Гріна, вінцевий добуток.

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, механіко-математичний факультет, 01601, Київ, вул. Володимирська 64, e-mail: eugenia@univ.kiev.ua

E.A. Kochubinska¹, Ph.D., Assistant Prof.

**On combinatorics of wreath product of
finite symmetric inverse semigroups**

Some combinatorial results (e.g. cardinality of semigroup, combinatorics of Green's relations, combinatorics of nilpotents) concerning wreath product of finite inverse symmetric semigroup are presented. Because of the recursive definition of the wreath product, a number of recurrent formulae, containing different types of known combinatorial objects, arises.

Keywords: symmetric inverse semigroup, Green's relations, wreath product.

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, Department of Mechanics and Mathematics, 01601, Kyiv, Volodymyrska str., 64, e-mail: eugenia@univ.kiev.ua

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

1 Basic definitions

For a set X , let $\mathcal{I}(X)$ denote the set of all partial bijections on X . Clearly, it is a semigroup under natural composition law. This semigroup is called the *full symmetric inverse semigroup* on X . If $X = \{1, \dots, n\}$, then semigroup $\mathcal{I}(X)$ is called the *full symmetric inverse semigroup of rank n* and is denoted $\mathcal{I}_n$.

Let S be a semigroup, (P, X) be a semigroup of partial transformations of the set X . Define the set S^{PX} as a set of partial functions from X to semigroup S :

$$S^{PX} = \{f : A \rightarrow S \mid \text{dom}(f) = A, A \subseteq X\}.$$

Given $f, g \in S^{PX}$, the product fg is defined in a following way:

$$\begin{aligned} \text{dom}(fg) &= \text{dom}(f) \cap \text{dom}(g), \\ (fg)(x) &= f(x)g(x) \text{ for all } x \in \text{dom}(fg). \end{aligned}$$

For $a \in P, f \in S^{PX}$, define f^a as:

$$\begin{aligned} (f^a)(x) &= f(ax), \\ \text{dom}(f^a) &= \{x \in \text{dom}(a); xa \in \text{dom}(f)\}. \end{aligned}$$

Wreath product of semigroup S with semigroup (P, X) of partial transformations of the set X is a set

$$\{(f, a) \in S^{PX} \times (P, X) \mid \text{dom}(f) = \text{dom}(a)\}$$

with composition defined by

$$(f, a) \cdot (g, b) = (fg^a, ab).$$

We will denote the wreath product of semigroups S and (P, X) by $S \wr_p P$.

Wreath product of inverse semigroups is an inverse semigroup. We can recursively define the wreath product of any finite number of inverse semigroups. Let T be a k -level n -regular rooted tree. By a partial automorphism we mean a root-preserving tree homomorphism defined on a connected subtree of T . The set $\text{PAut } T$ of all partial automorphisms of T forms an inverse semigroup under partial automorphisms composition.

Theorem 1. [3] *Let T be a rooted k -level n -regular tree. Then*

$$\text{PAut } T \cong \underbrace{\mathcal{I}_n \wr_p \mathcal{I}_n \wr_p \dots \wr_p \mathcal{I}_n}_k = (\wr_p \mathcal{I}_n)^k.$$

2 Basic combinatorics

This sections contains brief summary of results from [3].

For an arbitrary function F we denote

$$F^k(x) = \underbrace{F(F \dots (F(x)) \dots)}_k.$$

Proposition 1. $|(\imath_p \mathcal{I}_n)^k| = S^k(1)$, where $S(x) = \sum_{i=1}^n \binom{n}{i}^2 i! x^i$

Let $E(\mathcal{I}_n)$ be the set of idempotents of semigroup $\mathcal{I}_n$.

Proposition 2. An element $(f, a) \in S \imath_p \mathcal{I}_n$ is an idempotent if and only if $a \in E(\mathcal{I}_n)$ and

$$f(\text{dom}(a)) \subseteq E(\mathcal{I}_n).$$

In terms of partial tree automorphisms, it means that idempotent is a partial automorphism, which acts identically on its domain.

Proposition 3. Let $E((\imath_p \mathcal{I}_n)^k)$ be the set of idempotents of semigroup $(\imath_p \mathcal{I}_n)^k$. Then

$$|E((\imath_p \mathcal{I}_n)^k)| = F^k(1) = \underbrace{(((1+1)^n + 1)^n \dots + 1)^n}_k,$$

where $F(x) = (x+1)^n$.

Recall that Green's $\mathcal{R}$ -relation on inverse semigroup S is defined by

$$a \mathcal{R} b \Leftrightarrow aS^1 = bS^1,$$

similarly, Green's $\mathcal{L}$ -relation is defined by

$$a \mathcal{L} b \Leftrightarrow S^1 a = S^1 b,$$

Green's $\mathcal{J}$ -relation is defined by

$$a \mathcal{J} b \Leftrightarrow S^1 a S^1 = S^1 b S^1.$$

Green's $\mathcal{H}$ - and $\mathcal{D}$ -relations are derivative: $\mathcal{H} = \mathcal{R} \wedge \mathcal{L}$, $\mathcal{D} = \mathcal{R} \circ \mathcal{L} = \mathcal{L} \circ \mathcal{R}$.

Theorem 2. Let $(f, a), (g, b) \in (\imath_p \mathcal{I}_n)^k$. Then

- 1) $(f, a) \mathcal{L} (g, b)$ if and only if $\text{ran}(a) = \text{ran}(b)$ and $g^{b^{-1}}(z) \mathcal{L} f^{a^{-1}}(z)$ for all $z \in \text{ran}(a)$, where a^{-1} is the inverse element for a ;
- 2) $(f, a) \mathcal{R} (g, b)$ if and only if $\text{dom}(a) = \text{dom}(b)$ and $f(z) \mathcal{R} g(z)$ for all $z \in \text{dom}(a)$;

- 3) $(f, a) \mathcal{H} (g, b)$ if and only if $\text{ran}(a) = \text{ran}(b)$ and $\text{dom}(a) = \text{dom}(b)$, $g^{b^{-1}}(z) \mathcal{L} f^{a^{-1}}(z)$ and $f(z) \mathcal{R} g(z)$ for $z \in \text{dom}(a) \cap \text{ran}(a)$;
- 4) $(f, a) \mathcal{D} (g, b)$ if and only if there exists a bijection map $x : \text{dom}(b) \rightarrow \text{dom}(a)$ such that $f(zx) \mathcal{D} g(z)$ for all $z \in \text{dom}(x)$.
- 5) $\mathcal{D} = \mathcal{J}$.

It is well-known fact that in inverse semigroup each $\mathcal{R}$ ($\mathcal{L}$)-class contains exactly one idempotent, so the number of different $\mathcal{R}$ ($\mathcal{L}$)-classes in $(\imath_p \mathcal{I}_n)^k$ is equal to the number of idempotents of $(\imath_p \mathcal{I}_n)^k$.

Proposition 4. The number of $\mathcal{D}$ -classes of semigroup $(\imath_p \mathcal{I}_n)^k$ equals $P^k(1)$, where $P(x) = \binom{x+n}{n}$.

3 Combinatorics of cross-sections

Now let ρ be an equivalence relation on a semigroup S . A subsemigroup $H \subset S$ is called *cross-section with respect to ρ* (or simply ρ -cross-section) provided that H contains exactly one element from every equivalence class. Correspondingly, cross-sections with respect to $\mathcal{R}$ - ($\mathcal{L}$ -) Green's relations are called $\mathcal{R}$ - ($\mathcal{L}$ -) cross-sections. Note that every $\mathcal{R}$ - ($\mathcal{L}$ -) equivalence class contains exactly one idempotent. Then the number of elements in every cross-section is $|E(S)|$, where $E(S)$ is the subsemigroup of all idempotents of S .

Observe that a subsemigroup H of semigroup $\mathcal{I}_n$ is an $\mathcal{R}$ -cross-section if and only if for every subtree $\Gamma \subseteq T$ it contains exactly one element φ such that $\text{dom}(\varphi) = \Gamma$.

Let now $\{1, \dots, n\} = M_1 \sqcup M_2 \dots \sqcup M_s$ be an arbitrary decomposition of $\{1, 2, \dots, n\}$ into disjoint union of non-empty blocks, where the order of blocks is irrelevant. Assume that a linear order is fixed on the elements of every block: $M_i = \{m_1^i < m_2^i < \dots < m_{|M_i|}^i\}$.

For each pair i, j $1 \leq i \leq k$, $1 \leq j \leq |M_i|$ denote by $a_{i,j}$ the element in $\mathcal{D}$ -class D_{n-1} of rank $n-1$ of semigroup $\mathcal{I}_n$, containing chain $[m_1^i, m_2^i, \dots, m_j^i]$, that acts as identity on the set

$$\{1, \dots, n\} \setminus \{m_1^i, m_2^i, \dots, m_j^i\}$$

$a_{i,j}(m_k^i) = m_{k+1}^i$,
 $k = 1, \dots, j-1$, $m_{j-1}^i \notin \text{dom}(a_{i,j})$. Denote by $R = R(\overrightarrow{M_1}, \overrightarrow{M_2}, \dots, \overrightarrow{M_k})$ the semigroup $\langle a_{i,j} \mid 1 \leq i \leq k, 1 \leq j \leq |M_i| \rangle \sqcup \{e\}$. It is shown in [1,

Chapter 12] that $R = R(\overrightarrow{M_1}, \overrightarrow{M_2}, \dots, \overrightarrow{M_k})$ is an $\mathcal{R}$ -cross-section of $\mathcal{I}_n$.

Define the map

$$\varphi_\mu : \prod_{i=1}^k (S \wr \mathcal{I}((M_i))) \rightarrow S \wr \mathcal{I}_n$$

in the following manner: φ_μ maps the product $\prod_{i=1}^k (f_i, a_i)$ to the element (f, a) such that $a|_{M_i} = a_i$, $f|_{M_i} = f_i$.

Theorem 3. [2] Let $R(\overrightarrow{M_1}, \overrightarrow{M_2}, \dots, \overrightarrow{M_k})$ be an $\mathcal{R}$ -cross-section of semigroup $\mathcal{I}_n$, $R_1, \dots, R_k$ be $\mathcal{R}$ -cross-sections of semigroup $\mathcal{I}_m$. Then

$$R = \varphi_\mu \left((R_1 \wr R(\overrightarrow{M_1})) \times \dots \times (R_k \wr R(\overrightarrow{M_k})) \right)$$

is an $\mathcal{R}$ -cross-section of semigroup $\mathcal{I}_m \wr \mathcal{I}_n$.

Moreover, every $\mathcal{R}$ -cross-section of semigroup $\mathcal{I}_m \wr \mathcal{I}_n$ is isomorphic to

$$(R_1 \wr R(\overrightarrow{M_1})) \times \dots \times (R_k \wr R(\overrightarrow{M_k})).$$

A map $a \mapsto a^{-1}$ is an anti-isomorphism of semigroup $\mathcal{I}_m \wr \mathcal{I}_n$, that sends $\mathcal{R}$ -classes to $\mathcal{L}$ -classes. It is also clear that it maps $\mathcal{R}$ -cross-sections to $\mathcal{L}$ -cross-sections and vice-versa. Hence dualizing Theorem 3, one gets a description of $\mathcal{L}$ -cross-sections.

Theorem 4. [2] Let R', R'' be $\mathcal{R}$ -cross-sections of the semigroup $\mathcal{I}_m \wr \mathcal{I}_n$, $\varphi: R' \rightarrow R''$ be an isomorphism. Then there exists such an element $\Theta = (\vartheta, \theta) \in \mathcal{S}_m \wr \mathcal{S}_n$ that

$$\varphi((f, a)) = \Theta^{-1}(f, a)\Theta.$$

In other words, if $(f, a) \in R'$ and $(g, b) = \varphi((f, a))$, then $\text{dom } b = \theta(\text{dom}(a))$ and for any $x \in \text{dom}(a)$

$$\theta(a(x)) = b(\theta(x)),$$

$$g(\theta(x)) = \vartheta^{-1}(x)f(x)\vartheta(a(x)).$$

Corollary 1. Semigroup $\mathcal{I}_m \wr \mathcal{I}_n$ contains

$$(m!)^n n! \sum_{k=1}^n \frac{1}{k!} \binom{n-1}{k-1} \left(\sum_{i=1}^m \frac{1}{i!} \binom{m-1}{i-1} \right)^k$$

different $\mathcal{R}$ -($\mathcal{L}$ -) cross-sections.

Corollary 2. The number of non-isomorphic $\mathcal{R}$ -($\mathcal{L}$ -) cross-sections of $\mathcal{I}_m \wr \mathcal{I}_n$ is

$$\sum_{\substack{j_1, j_2, \dots, j_n \geq 0 \\ j_1 + 2j_2 + \dots + nj_n = n}} \prod_{i=1}^m \binom{p_m + j_i - 1}{j_i},$$

where p_n denotes the number of decompositions of n into the sum of positive integers, where the order of summands is not important.

4 Maximal nilpotent subsemigroups and its combinatorics

Let S be a semigroup with a zero element 0. An element $a \in S$ is called *nilpotent* if for some $r \in \mathbb{N}$ $a^r = 0$. Semigroup S is called *nilpotent* if for some $r \in \mathbb{N}$

$$a_1 \cdot a_2 \cdot \dots \cdot a_r = 0$$

for arbitrary $a_1, a_2, \dots, a_r \in S$.

Usually, two classes of nilpotent subsemigroups are distinguished. First class includes nilpotent subsemigroup containing semigroup zero 0. In this case we have $H^r = \{0\}$ for some $r > 0$, $H \subset S$. Second class includes subsemigroups of S , which are nilpotent as semigroups, but their zero element may differ from 0. In this case we have $H^r = \{e\}$ for some idempotent and some $r \geq 1$. We will call these subsemigroups *proper nilpotent subsemigroups*.

A nilpotent subsemigroup $H \subset S$ is called *maximal nilpotent subsemigroup*, if it is not contained in any other nilpotent subsemigroup $H' \subset S$, $H \neq H'$.

For a semigroup $\mathcal{I}_n$ there is a one-to-one correspondence between maximal nilpotent subsemigroups and partitions of the set $\{1, 2, \dots, n\}$ into disjoint union of ordered blocks:

If e is an idempotent, which is the zero in a $T \subset \mathcal{I}_n$, and

$$\overline{\text{dom}(e)} = \{a_1, a_2, \dots, a_k\},$$

then every maximal nilpotent subsemigroup corresponds to a permutation $b_1, b_2, \dots, b_k$ of $a_1, a_2, \dots, a_k$ and has the form:

$$T = \left\{ \sigma \in \mathcal{I}_n \mid \text{dom}(e) \subseteq \text{dom}(\sigma); \right. \\ \left. \sigma(x) = x \text{ for all } x \in \text{dom}(e); \right.$$

$$\left. \sigma(b_i) = b_j \text{ implies } i < j \text{ for all } b_i \notin \text{dom}(e) \right\}$$

Details can be found in [1, Chapter 8].

Consider maximal nilpotent subsemigroups (those containing the semigroup zero) in a slightly more general setting.

Let P be an inverse semigroup.

Lemma 1. *An element $(f, a) \in P \wr_p \mathcal{I}_n$ is nilpotent iff $a \in \mathcal{I}_n$ is nilpotent.*

Proposition 5. *Let S be a maximal nilpotent subsemigroup of the semigroup $\mathcal{I}_n$. Then subsemigroup $P \wr_p S$ is a maximal nilpotent subsemigroup of the semigroup $P \wr_p \mathcal{I}_n$. Moreover, every maximal nilpotent subsemigroup of semigroup $P \wr_p \mathcal{I}_n$ is of this form.*

Corollary 3. *Maximal nilpotent subsemigroup of semigroup $(\wr_p \mathcal{I}_n)^k$ are those having the form*

$$((\wr_p \mathcal{I}_n)^{k-1}) \wr_p S,$$

where S is a maximal nilpotent subsemigroup of the semigroup $\mathcal{I}_n$.

Now consider proper maximal nilpotent subsemigroups.

Let T be a proper nilpotent subsemigroup of $\text{PAut } T$ with a zero $e \in E(\text{PAut } T)$. Denote by T_x the maximal subtree of T such that its root is $x \in VT$ and none of the edge of T_x is in $\text{dom}(e)$.

Theorem 5. *Let T be k -level n -regular rooted tree. Proper maximal subsemigroup of $\text{PAut } T$ is (canonically) isomorphic to*

$$\prod_{x \in \text{dom}(e)} \text{Nilp}_x,$$

where Nilp_x is a maximal nilpotent subsemigroup of $\text{PAut } T_x$.

Proposition 6. *The cardinality of a maximal subsemigroup of $P \wr_p \mathcal{I}_n$ is equal to*

$$|P|^n B_n \left(\frac{1}{|P|} \right),$$

where $B_n(x)$ denotes the n th Bell polynomial.

Consequently, the cardinality of a maximal subsemigroup of $(\wr_p \mathcal{I}_n)^k$ is

$$\left| (\wr_p \mathcal{I}_n)^{k-1} \right|^n B_n \left(\frac{1}{|(\wr_p \mathcal{I}_n)^{k-1}|} \right).$$

Proposition 7. *The number of proper maximal nilpotent subsemigroups of $\text{PAut } T$ with a zero $e \in E(\text{PAut } T)$ equals*

$$\prod_{x \in \text{dom}(e)} (k_x)!,$$

where k_x is the number of vertices of the first level of the tree T_x .

Let $l(x)$ be the level of T , where the vertex x lies, let $h(x) = k - l(x) + 1$. The cardinality of every maximal proper nilpotent subsemigroup equals

$$\prod_{x \in \text{dom}(e)} \left| (\wr_p \mathcal{I}_n)^{h(x)} \right|^{k_x} B_{k_x} \left(\frac{1}{|(\wr_p \mathcal{I}_n)^{h(x)}|} \right).$$

Список використаних джерел

1. Ganyushkin O., Mazorchuk V. Classical finite transformation semigroups. An introduction. / Ганюшкін О. London: Springer, 2009. – xii, 314 p.
2. Kochubinska Ye. On isomorphisms of $\mathcal{R}$ - and $\mathcal{L}$ -cross-sections of wreath products of finite inverse symmetric semigroups. / Кочубінська Є. // Int. J. Algebra Comput., vol. 19 (2009), no. 8, pp. 999 – 1010.
3. Kochubinska Ye. Combinatorics of partial wreath power of finite inverse symmetric semigroup $\mathcal{IS}_d$. / Кочубінська Є. // Algebra and Discrete Mathematics, no. 1 (2007), pp. 49–61.

Надійшла до редколегії 14.03.2013

УДК 681.3.062

В. Лісикевич¹, аспірантка.
О. Пришляк², проф., д. ф.-м.н.

Пошарова та топологічна еквівалентність m -функцій

Вивчається пошарова та топологічна еквівалентність m -функцій на двовимірному диску, що еквівалентна топологічній класифікації векторного поля косого градієнта $sgrad f$.

Побудовані графи Ріба для m -функцій з n критичними точками, що задають пошарову еквівалентність, та написано алгоритм для побудови двох топологічно неізоморфних графів, що задають топологічну еквівалентність.

Ключові слова: граф Ріба, атом, молекула

^{1,2}Київський національний університет імені Тараса Шевченка (вул. Володимирська 65/13, м. Київ, 01601, Україна)

E-mail: vikadruk@ukr.net, prishlyak@yahoo.com

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

V. Lisykevych¹, Postgraduated Student
O. Prishlyak², Ph.D.

Layers and topological equivalent of m -functions.

The layering and topological equivalence of m -functions on the two-dimensional disc are studied, which is equivalent to the topological classification of gradient vector field oblique $sgrad f$.

Rib's graphs of m -functions with n critical points that asks layered equivalence are constructed and an algorithm to construct two topologically non-isomorph graphs that asks topological equivalence is written.

Keywords: Rib's graph, atom, molecule

^{1,2} Taras Shevchenko National University of Kyiv
(Volodymyrska st., 65/13, Kyiv, 01601, Ukraine)

Introduction

Let M is a closed two-dimensional manifold, f – smooth function on M . Consider the Hamiltonian dynamical system, given by the equation $\frac{dx}{dt} = sgrad f(x)$, $x \in M$. Then its trajectory lying on the components of the line-level function f . These components are called layers. Homeomorphism surface reflecting layers on layers, called layers equivalence. Thus, the layered classification function sets the topological classification of Hamiltonian dynamical systems. In general function can be quite complex structure. However, the set of all functions can be divided into open everywhere dense subset consisting of simple Morse functions. Konrod A. and G. Rib for research functions have filled graph obtained from the surface after charging each layer to the point. This graph is a complete topological invariant of simple Morse functions. For arbitrary Morse functions except this column should additional information.

In the work O.V. Bolsinov and A. T. Fomenko proposed layered neighborhood of critical level to call atom and Rib's graph, in which vertices correspond to atoms and edges correspond components of atoms, to call molecule. Then it

was possible to build a layered and arbitrary topological classification of Morse functions. For manifolds with boundary analogue of Morse functions is m -functions. It is a function, in which all critical points are nondegenerate and such that the restriction of the function on the border is a Morse function. Topological properties of m -functions studied in the works of S. Maksymenko for topological classification of m -functions used graphs with an involution.

The aim is to complete layering and topological classification of m -functions on the two-dimensional disc, which is equivalent to the topological classification of gradient vector field of oblique $sgrad f$. The objective of the work is to construct Rib's graphs of m -functions with n critical points that asks layered equivalence and write an algorithm to construct two topologically non-isomorph graphs that asks topological equivalence.

1 Basic notions

We consider all m -function, in which there are no internal critical points, but there are only critical points on a border.

a is a regular value of the function, c is a critical value of the function.

Arbitrarily small movements of the m -function can achieve that at each critical level c , the set of

points x , for which $f(x) = c$, lying exactly one critical point. In other words, the critical points that were on the same level, can be made to lying on nearby level.

Definition: m -function which has exactly one critical point in each level is called simple.

Let f is m -function on the two-dimensional disk. Consider an arbitrary segment level $f^{-1}(a)$ and its connectivity components that are called layers. As a result, the disk is partitioned in association layers and get a bundle of features. Got a space layer Γ . For m -function space Γ is a graph.

Definition: Graph Γ is called Rib's graph of m -function f on the two-dimensional disk G . Vertex of Rib's graph is called finite if it is the end of exactly one edge of the graph. All other vertex is called internal.

Let f is m -function on two-dimensional disk G such that $f: G \rightarrow \mathbb{R}$. Let g is the other m -function on the other two-dimensional disk H such that $g: H \rightarrow \mathbb{R}$. Consider the question of equivalence of two m -functions. Consider the pair (G, f) and (H, g) .

Definition: The functions f, g on the corresponding two-dimensional layer discs will be called equivalent if there exists a diffeomorphism $\lambda: G \rightarrow H$, which switches connected components of level lines of f in connected components of level lines function g .

Definition: The functions f, g on the corresponding two-dimensional disk will be called topologically equivalent if there are homeomorphisms $h: G \rightarrow H, h': \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, for which there is equality $f \circ h = h' \circ g$.

If a is a regular value, then the corresponding line level is a segment. These segments are rearranged when passing through a particular level of function.

Atom A: neighborhood of local extremum of function.



Picture 1. Atom A and its Rib's graph

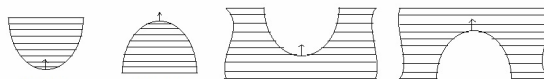
the f



Picture 2. Atom B and its Rib's graph

That is, for each of the two atoms have two cases:

- 1) the gradient field directed inward;
- 2) the gradient field directed outward.

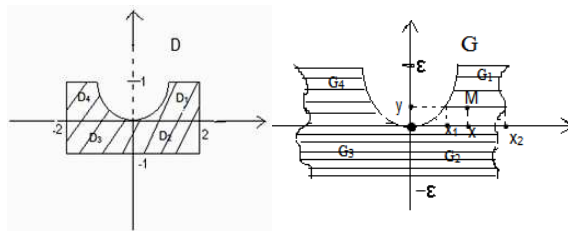


Picture 3. Atoms A_1, A_2, B_1, B_2

2 Preliminary results

Theorem (about atom B). For any point which is not a local extremum of m -function exists a homomorphism φ , which reflecting the neighborhood of this point (region G) on the standard area $D = \{x, y \mid x^2 + (y - 1)^2 \geq 1, x \in [-2, 2], y \in [-1, 1]\}$.

Proof. Consider the region $D = \{x, y \mid x^2 + (y - 1)^2 \geq 1, x \in [-2, 2], y \in [-1, 1]\}$, is shown at the picture 4.



Picture 4. Regione D and region G.

Consider the point $M(x, y) \in G_1$. Let this point is located at the level y , where $x_1 = f^{-1}(f(x)) \cap S^1, x_2 = f^{-1}(f(x)) \cap \partial M$.

Construct a homomorphism that will translate the point $M(x, y)$ into the point $M'(x', y') \in D$. For coordinate y' get $y' = \frac{y - f(x_0, y_0)}{z}$.

For each x' and y' we know, that $\{x, y \mid (x')^2 + (y' - 1)^2 \geq 1\}$ are the points from the border, therefore $x' \geq \pm \sqrt{1 - (y' - 1)^2}$.

Let divide the region G into 4 regions G_1, G_2, G_3, G_4 , corresponding to quadrants of the plane OXY .

First, let consider I the quadrant, scilicet region G_1 . Therefore here $x' \geq \sqrt{1 - (y' - 1)^2}$, reflected on D_1 . Hence we obtain $x_1 = \sqrt{1 - (y' - 1)^2}$. Then $x' = \frac{\rho(x_1, x)}{\rho(x_1, x_2)} \cdot (2 - x_1) + x_1$.

Next, consider the second quadrant, that is the region that reflected on D_2 (standard region). Consider $M(x, y) \in G_2$, located at the level y , where $x_1 = f^{-1}(f(x)) \cap S^1, x_2 = f^{-1}(f(x)) \cap \partial M$ is the end of a level, which belong to G_2 . Then

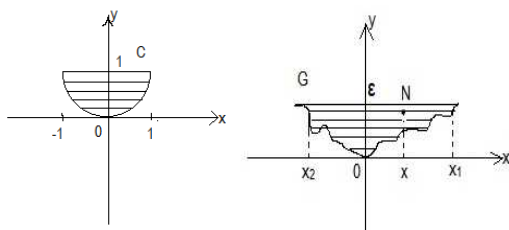
$y' = \frac{y-f(x_0, y_0)}{\varepsilon}$, $x' = \frac{\rho(x_1, x_2)}{\rho(x_1, x_2)} \times 2$. That got the formulas of transition.

For the third quadrant have the following formulas of transition: $y' = \frac{y-f(x_0, y_0)}{\varepsilon}$, $x' = \frac{\rho(x_1, x_2)}{\rho(x_1, x_2)} \times (-2)$.

For fourth quadrant get $y' = \frac{y-f(x_0, y_0)}{\varepsilon}$, $x' = \frac{\rho(x_1, x_2)}{\rho(x_1, x_2)} \times (-2 - x_1) + x_1$. Theorem is proofed.

Theorem (about atom A). For any point of local extremum of m – function exists a homomorphism ψ , reflecting the neighborhood of this point by the standard area $C = \{x, y | x^2 + (y-1)^2 \leq 1, y \in [0, 1]\}$

Proof. Let Build a homomorphism that translates region G into the region C .



Picture 5. Region C and Region D.

Define this homomorphism separately for the coordinates y and x . For example let considerate point $N(x, y) \in G$, which translate into the point $N(x', y') \in C$.

Let considerate distances $\rho(x_1, x_2)$ and $\rho(x_1, x)$. The picture shows that the first distance is greater than the second. Then $\frac{\rho(x_1, x_2)}{\rho(x_1, x)} \leq 1$. Let $x_* = \sqrt{1 - (y-1)^2}$ – points from ∂C , then we obtain the formula of the transition x into x' : $x' = \frac{\rho(x_1, x_2)}{\rho(x_1, x)} \cdot (1 - x_*) + x_*$. For coordinates y : $y' = \frac{y-f(x_0, y_0)}{\varepsilon}$, where $f(x_0, y_0)$ – value of the function at the critical point. Theorem is proofed.

Theorem. Any simple atom coincides with the atom A_1, A_2, B_1, B_2 .

Proof. There are two cases: either the point is a local extremum or not. So then we get 4 cases. Consider the case when the point is a local extremum, then the vector directed either inward or outward. Then the previous theorem showed that this object is homeomorphic standard field and thus coincide respectively with the corresponding atoms A_1, A_2, B_1, B_2 . Theorem is proofed.

Let f is a simple m – function on two-dimensional disk G . Consider its Rib's graph Γ . Its vertices correspond to the critical layers m -function. Let's replace neighborhood of these vertexes with

corresponding atoms A_1, A_2, A_3, A_4 . The resulting graph will be called a molecule W .

The concept of simple molecules actually no different from Rib's graph for simple m – function, but for complex m – function, molecule will carry a more information than Rib's graph. Consider a finite connected graph with vertices of degrees 1, 2 and 3. In each vertex of multiplicity 1 place the atom A_1, A_2 (depending on the minimum or maximum). At each vertex of multiplicity 3 we put B_1, B_2 .

2.1 Layers equivalence of m – functions

Theorem (implementation for layering equivalence). For each molecule W exists a function that defines this molecule up to a layer-equivalence.

Proof. Consider the molecule W , which is embedded in $\mathbb{R}^2$. Consider the neighborhood of the molecule and the function of the height $f(x, y) = y$.

So, to get a function that sets this molecule, we use the following. We divide the molecule under the following simple molecules (picture 6).



Picture 6. Simple molecules.

These four cases are considering getting a small neighborhood of the vertex of the molecule that is incident to three edges. In particular, the last two - a small neighborhood of a vertex that is incident to one edge.

Then have the following four parts (picture 3) corresponding m – function (m - function constraints per atom).

Indeed, a molecule tells us that of which pieces we need to stick together border of m -function, which components of its border should be taken. Theorem is proofed.

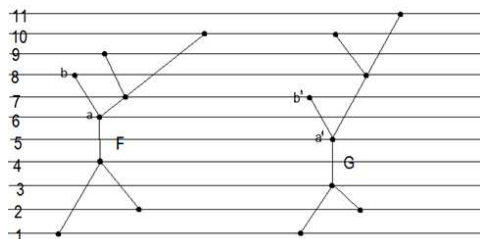
Definition: We say that graphs are layers isomorphic if for each vertex from the fact that $f(x_i) < f(x_j)$ implies that $f(x'_i) < f(x'_j)$, the edges have the same monotony. A similar definition for layers isomorphic molecules.

Definition: We say that graphs are topologically isomorphic if for every vertex $f(x_i, y_i) = f(x'_i, y_i) = y_i$. A similar definition for topologically isomorphic molecules.

Theorem (Layered equivalence of m – functions). Let $W(G, f)$ and $W(H, g)$ – simple molecules of two simple m – functions on the two-dimensional disks G i H . If the molecules are layers

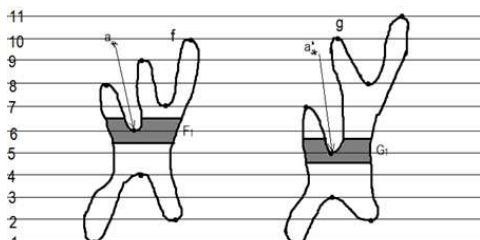
isomorphic, the functions f and g are layers equivalent.

Proof. Consider two molecules F and G (Picture 7) are isomorphic, exists homomorphism that transits a vertex a into vertex a' , b into vertex b' .



Picture 7. Molecules F and G .

Consider the functions f and g . For each vertex we have a molecule corresponding (picture 8) to the extremum point of the function $a \rightarrow a_*$, $a' \rightarrow a'_*$.



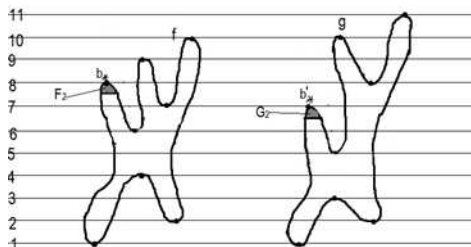
Picture 8. Corresponding m -function for F and G molecules.

For each such point $(a, \text{and } a')$ take a neighborhood, then get atoms homeomorphic to the standard atom B_1 . By theorem about atom B such homomorphism exists. Let

$$\varphi_1: F_1 \rightarrow B_1, \varphi_2: G_1 \rightarrow B_1.$$

$$\text{Then } \varphi = \varphi_1 \circ \varphi_2^{-1}: F_1 \rightarrow G_1.$$

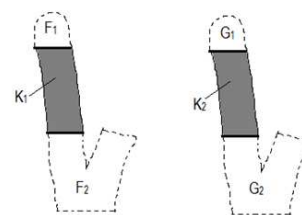
Similarly, construct a homomorphism to a neighborhood of each critical point functions f and g . The corresponding figures are shown at the picture 9.



Picture 9. The neighborhood of critical point.

$\psi_1: F_2 \rightarrow A_2, \psi_2: G_2 \rightarrow A_2$. Hence we obtain the reflection $\psi = \psi_1 \circ \psi_2^{-1}: F_2 \rightarrow G_2$, that translates a neighborhood of the critical point of the function f in the corresponding neighborhood of the critical point of the function g .

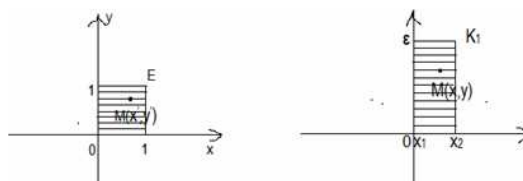
Consider further parts of molecules that are shown in the pictures 10.



Picture 10. Some parts of m -function.

It is clear that we have built an reflection except homomorphism $\gamma: K_1 \rightarrow K_2$. Let construct it.

Place K_1 in the coordinate plane. And transits it on the standard square $E = \{(x, y) | x \in [0, 1], y \in [0, 1]\}$ (pic.11)



Picture 11. Region E and K_1

We have reflection γ_1 such as $x' = \frac{\varphi(x_1, x_2)}{\varphi(x_1, x_2)}$, $y' = \frac{y - f(x_0, y_0)}{z}$, where $f(x_0, y_0)$ is a value of function in this case at the point $(0, 0)$, because in that way we placed K_1 . So have $\gamma_1: K_1 \rightarrow E$. Similarly, we obtain $\gamma_2: K_2 \rightarrow E$. Hence $\gamma = \gamma_1 * \gamma_2^{-1}: K_1 \rightarrow K_2$. Prove that φ and γ coincide on the border. Studying these formulas homomorphisms, we see that they are given so that the stored lengths of proportionality.

So get a reflection that is layered equivalency. That is, applying φ, ψ, γ in turns according to the type (kind) of the critical point and stick the edge get $\lambda = \varphi * \psi * \gamma$ – diffeomorphism that is layered equivalency.

Theorem is proved.

2.2 Topological equivalence of m – function

Theorem (implementation for topological equivalence). For each molecule W exists a function that defines this molecule up to topological equivalence.

Proof: Consider the molecule W , which is embedded in $\mathbb{R}^2$. So to get the function to this molecule sets, we use the following picture 6.

These four cases we get when considerate a small neighborhood of the vertex of the molecule that is incident to three edges. In particular, the last two - a small neighborhood of a vertex that is incident to one edge. Then have the following four parts corresponding m -function (m - function constraints per atom, picture 3).

Indeed, a molecule tells us that of which pieces we need to stick border of m -function, which the

components of its boundary should be taken. For getting m –function we need:

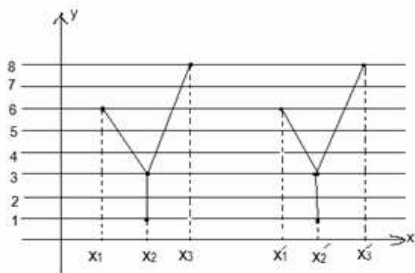
- 1) Each vertex placed at their level;
- 2) In each of the points we see, which part of the molecule, corresponding to the neighborhood of this point;
- 3) Draw at this point the restriction of m – functions per atom;
- 4) Knowing how to point, which were connected on the molecule, for a function that would mean monotony appropriate.
- 5) In paragraph 3, we still have only some fragments of atoms, so now by paragraph 4 (knowing the monotony), then paste $I \times [0,1]$, where I – segment of length equal to the number of levels between critical points whose atoms we put together. For example, the first point is located on the first level 1, and the second on the 5th, then $I=[1+\varepsilon, 5-\varepsilon]$.

Function is built.

Theorem is proofed.

Theorem (topological equivalence of m – function). Let $W(G, f)$ and $W(H, g)$ – simple molecules of two simple m -functions on the two-dimensional disks G and H . If the molecules are topologically isomorphic, the functions f and g are topologically equivalent.

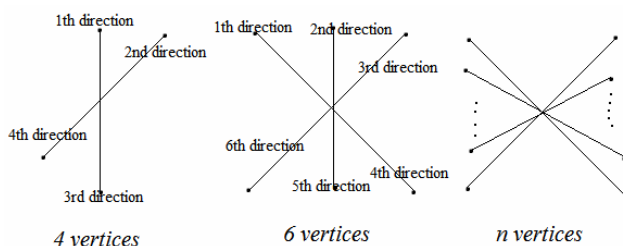
Proof: Consider two topologically isomorphic molecules and the corresponding m –functions.



3 Algorithm of finding number of topological nonequivalent m –functions.

The purpose of writing a program is to count the number of topologically nonequivalent m -functions, which Rib's graph containing n vertices.

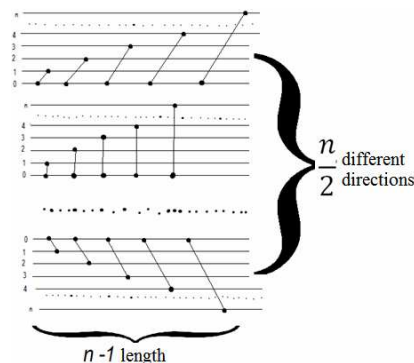
Part 1. Total there are n directions for edges of the Rib's graph of m -functions. There is an example on the picture 13.



Picture 13. Possible directions .

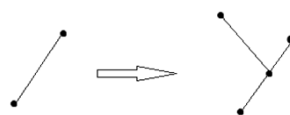
That is, for each vertex we have $\frac{n}{2}$ different directions and $\frac{n}{2}$ their opposite directions. For each edge fix its maximum length that can equal numbers from 1 to n .

Getting $\frac{n}{2} \times (n-1)$ different edges.



Picture 14. Possible edges

$j=1, \dots, \frac{n}{2}$ (choose from ready edges), add new edge. An example is shown on the picture 15.



Picture 15. An example.

if the
ction

Exist homomorphisms $\varphi: F_2 \rightarrow G_2$, $\psi: F_1 \rightarrow G_1$, $\gamma: F_3 \rightarrow G_3$, which when pasting provide topologically equivalent m -functions by the theorem implementation for topological equivalence.

Theorem is proofed.



Picture 16. An example.

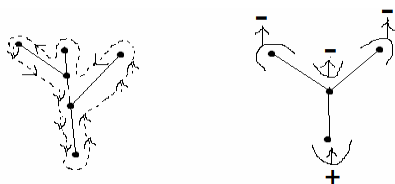
And for that edge that we have added select where it will be situated. So choose one of the vertexes (levels) that still free (Picture 17).



Picture 17. Possible positions for the edge.

Then go from j to $j + 1$ and write these columns in the array.

Part 3. All these graphs have $n - 1$ edges. Next, define the m -function, which corresponds to the resulting graph. We pass on all graphs defining the substitution of «+» and «-».



Picture 18. First step for building m -function.

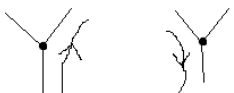
point (vertex of graph).

Then check if the number of vertices, which we avoided is new. If so, add its number in permutation.

The vertex is new if program passed it by one of the following two ways (an example is on the picture 19), when the top has changed to the opposite direction (downward).



Picture 19. An example.



Picture 20. An example.

appropriate cell fits if realized this permutation on the corresponding set of «+» i «-».

Then based two-dimensional table with those implemented. Print a table on the screen.

4 Result: number of m -functions

The number of layers non-equivalent m -functions with the appropriate number of critical points.

4 critical points – 2 layers non-equivalent m -functions;

6 critical points – 17 layers non-equivalent m -functions;

8 critical points – 134 layers non-equivalent m -functions.

The number of topologically nonequivalent m -functions with the appropriate number of critical points.

4 critical points – 4 topologically nonequivalent m -functions

6 critical points – 72 topologically nonequivalent m -functions

8 critical points – 2960 topologically nonequivalent m -functions.

Список використаних джерел

1. А.В.Болсинов, А.Т.Фоменко. Интегрируемые гамильтоновы системы. Геометрия, топология, классификация. Том I. – Ижевск: Издательский дом «Удмуртский университет», 1999, стр. 68-70.

2. А.О.Пришляк. Эквивалентность m -функций на трехмерных многообразиях с углами // Доповіді НАНУ №6, 2000. – с. 22-26

3. Н.В. Лукова-Чуйко, О.О. Пришляк. Пошарова еквівалентність m -функцій загального положення на 3-многовидах з межею// Журнал обчисл. та прикл. матем. – 2011.- №3(106) – с.114-123.

4. О.О.Пришляк, К.О.Пришляк, Н.В.Лукова-Чуйко. M -функції на неорієнтованих поверхнях// Журнал обчисл. та прикл. матем. – 2012.- №2(108) – с.176-185.

5. Sharko V.V. On topological equivalence Morse functions on surfaces// Proc.International Conf. “Low-dimensional Topology and Combinatorial Group Theory”. – Chelyabinsk (Russia), 1996. – P. 19-23.

6. Prishlyak A.O. Topological classification of smooth functions with isolated critical points on 3-manifolds // Theses of the reports to the 4-th international conference on geometry and topology, Cherkasy, 2001

Надійшла до редколегії 14.04.2013

УДК 519.21

Г.М. Шевченко¹, к. ф.-м. н., доцент

Локальні часи для мультидробових квадратично гауссівських процесів

У статті розглядаються мультидробові процеси, які задаються подвійним інтегралом Іто–Вінера з певним ядром і є узагальненнями мультидробового процесу Розенблатта. Для таких процесів доведено неперервність та існування квадратично інтегрованого локального часу.

Ключові слова: процес Розенблатта, мультидробовий процес, локальний час.

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, механіко-математичний факультет, 01601, Київ, вул. Володимирська 64, e-mail: zhora@univ.kiev.ua

G.M. Shevchenko¹, Ph.D., Associate Prof.

Local times for multifractional square Gaussian processes

We consider multifractional process given by double Itô–Wiener integrals, which generalize the multifractional Rosenblatt process. We prove that this process is continuous and has a square integrable local time.

Keywords: Rosenblatt process, multifractional process, local time.

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, Department of Mechanics and Mathematics, 01601, Kyiv, Volodymyrska str., 64, e-mail: zhora@univ.kiev.ua

Communicated by Prof. Kozachenko Yu.V.

Introduction

Fractional processes play an important role in modeling the long-range dependence property. In view of this, they find numerous applications, most notably in financial mathematics, geophysics, hydrology, telecommunication research etc. The most popular among fractional processes is the Gaussian one, viz. the fractional Brownian motion. However, it has several drawbacks. Firstly, its increments are stationary, which does not allow to model processes whose properties vary essentially as time flows. Secondly, it is self-similar, so has similar properties on different time scales, yet only few real-world processes have this property. Lastly, it has Gaussian distribution, so its tails are extremely light.

In view of these drawbacks, several authors considered some generalizations of fractional processes. To address the first two drawbacks, it is useful to introduce some multifractional processes, by letting the memory parameter to vary with time. On this way, some multifractional counterparts of fractional Brownian motion were proposed in [1, 6, 7], to name only a few. These processes are also Gaussian, so they do not solve the light tails problem. Therefore, in [9], a multifractional analogue of Rosenblatt process was defined. The Rosenblatt process has a general-

ized chi-square distribution, so its tails are heavier than Gaussian ones. The Rosenblatt process first appeared in [8]. It was investigated in many articles, we cite only [10], where some applications of the Rosenblatt process in financial modeling were considered. To allow for more flexibility, recently in [4] a generalization of Rosenblatt process was proposed; the authors also proved that this process appears naturally as a limit of some normalized cross-variation of two different fractional Brownian motions. In the present paper we consider a multifractional analogue of the generalized Rosenblatt process.

The paper is organized as follows. In Section 1, we give necessary information about double stochastic integrals and local times. In Section 2, we introduce the main object, the multifractional generalized Rosenblatt process, and show that it has a Hölder continuous modification. Finally, in Section 3, we prove that this process has a square integrable local time.

1 Preliminaries

Throughout the article, the symbol C will denote a generic constant whose value is not important and may change from line to line.

First we give provide essential information on double stochastic integrals. More information can

be found in [5].

Let W be the standard Wiener measure on the real line, i.e. a random measure with independent values on disjoint sets, such that for a Borel set A of a finite Lebesgue measure $\lambda(A)$, $W(A)$ has a centered Gaussian distribution with the variance $\lambda(A)$.

The double stochastic Itô–Wiener integral is constructed as follows. Let $\widehat{L}^2(\mathbb{R}^2)$ be the Hilbert space of symmetric square integrable functions on $\mathbb{R}^2$ with the norm $\|\cdot\|$. Suppose $f \in \widehat{L}^2(\mathbb{R}^2)$ is a symmetric simple function of the form

$$f(x, y) = \sum_{k,j=1}^n a_{kj} \mathbf{1}_{A_k}(x) \mathbf{1}_{A_j}(y), \quad (1)$$

where $A_1, \dots, A_n$ are disjoint sets in $\mathbb{R}$ of a finite Lebesgue measure, $a_{kj} = a_{jk}$ for all $k, j = 1, \dots, n$, $a_{kk} = 0$ for all $k = 1, \dots, n$. Then we define

$$\begin{aligned} I_2(f) &= \iint_{\mathbb{R}^2} f(x, y) W(dx) W(dy) \\ &= \sum_{k,j=1}^n a_{kj} W(A_k) W(A_j). \end{aligned}$$

The map I_2 can be extended to a linear isometry on $\widehat{L}^2(\mathbb{R}^2)$. Its properties are the following.

1. Let $a, b \in L^2(\mathbb{R})$ be orthogonal and $f = a \widehat{\otimes} b \in \widehat{L}^2(\mathbb{R}^2)$ be their symmetric tensor product, that is $f(x, y) = (a(x)b(y) + a(y)b(x))/2$. Then $I_2(h) = I_1(a)I_1(b)$.

2. For all $a \in L^2(\mathbb{R})$, $I_2(a \widehat{\otimes} a) = (I_1(a))^2 - \|a\|_{L^2(\mathbb{R})}^2$.

3. Define, for a function $f \in \widehat{L}^2(\mathbb{R}^2)$, a Hermitian operator

$$(M_f a)(x) = \int_{\mathbb{R}} f(x, y) a(y) dy.$$

Let $\lambda_{k,f}$, $k \geq 1$ be its eigenvalues ordered by absolute value (largest first) and $\varphi_{k,f}$, $k \geq 1$ be the corresponding eigenfunctions. Then, since

$$f(x, y) = \sum_{k \geq 1} \lambda_{k,f} \varphi_{k,f} \widehat{\otimes} \varphi_{k,f},$$

we have

$$I_2(f) = \sum_{k \geq 1} \lambda_{k,f} (\zeta_k^2 - 1),$$

with $\zeta_k = I_1(\varphi_{k,f})$ being independent standard Gaussians. Therefore, the characteristic function

of $I_2(f)$ is

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[e^{i\alpha I_2(f)} \right] &= \prod_{k \geq 1} \mathbb{E} \left[e^{i\alpha \lambda_{k,f} (\zeta_k^2 - 1)} \right] \\ &= \prod_{k \geq 1} \frac{e^{-i\alpha \lambda_{k,f}}}{\sqrt{1 - 2i\alpha \lambda_{k,f}}}, \end{aligned} \quad (2)$$

and it admits the estimate

$$\begin{aligned} \left| \mathbb{E} \left[e^{i\alpha I_2(f)} \right] \right| &= \left(\prod_{m \geq 1} (1 + 4\alpha^2 \lambda_{k,f}^2) \right)^{-1/4} \\ &\leq \left(1 + 4\alpha^2 \sum_{k \geq 1} \lambda_{k,f}^2 + 16\alpha^4 \sum_{j < k} \lambda_{j,f}^2 \lambda_{k,f}^2 \right. \\ &\quad \left. + 64\alpha^6 \sum_{j < k < l} \lambda_{j,f}^2 \lambda_{k,f}^2 \lambda_{l,f}^2 \right)^{-1/4}. \end{aligned} \quad (3)$$

Finally, we mention that by [3, Corollary 7.36], for each $m \geq 2$ there exists a constant C_m such that for every $f \in \widehat{L}^2(\mathbb{R}^2)$,

$$\mathbb{E} [I_2(f)^m] \leq C_m (\mathbb{E} [I_2(f)^2])^{m/2}. \quad (4)$$

Further we give some basics about local times.

Let $\{Z_t, t \geq 0\}$ be a separable random process. The *occupation measure* for Z is defined as follows: for Borel $A \subset [0, \infty)$, $B \subset \mathbb{R}$,

$$\mu(A, B) = \lambda(\{s \in A, Z_s \in B\}),$$

and the *local time* is the Radon–Nikodym derivative $L(A, x) = \frac{d\mu(A, \cdot)}{d\lambda}(x)$.

We need the following proposition from [2].

Proposition 1. A process $\{Z_t, t \geq 0\}$ has a local time $L(A, x) \in L^2(\mathbb{R} \times \Omega)$ iff

$$\int_{\mathbb{R}} \int_A \int_A \mathbb{E} \left[e^{iv(Z_t - Z_s)} \right] ds dt dv < \infty. \quad (5)$$

2 Generalized multifractional Rosenblatt process and its basic properties

The generalized Rosenblatt process was introduced in [4]. For $H_1, H_2 \in (1/2, 1)$, define the kernel

$$\begin{aligned} K_{H_1, H_2}(t, x, y) &= (s - x)_+^{H_1/2-1} (s - y)_+^{H_2/2-1} \\ &\quad + (s - x)_+^{H_2/2-1} (s - y)_+^{H_1/2-1}. \end{aligned}$$

Definition 1. For $H_1, H_2 \in (1/2, 1)$, the process

$$Y_t^{H_1, H_2} = \iint_{\mathbb{R}^2} \int_0^t K_{H_1, H_2}(s, x, y) ds W(dx) W(dy)$$

is the *generalized Rosenblatt process* with parameters H_1 and H_2 .

It was shown in [4] that Y^{H_1, H_2} is an $H/2$ -selfsimilar process with stationary increments.

Remark 1. In fact, the definition in [4] differs from the one here by some normalizing constant. For the sake of technical simplicity, we omit this constant.

Now we define a multifractional counterpart of the generalized Rosenblatt process. Let, for a fixed $T > 0$, $H_i: [0, T] \rightarrow (1/2, 1)$, $i = 1, 2$, be continuous functions.

Definition 2. The process

$$X_t = Y_t^{H_1(t), H_2(t)} = \iint_{\mathbb{R}^2} \int_0^t K_{H_1(t), H_2(t)}(s, x, y) ds W(dx) W(dy)$$

will be called a *multifractional generalized Rosenblatt process*.

Denote for $i = 1, 2$ $\hat{H}_i = \min_{t \in [0, T]} H_i(t)$, $\check{H}_i = \max_{t \in [0, T]} H_i(t)$. Let also $\hat{H} = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)/2$, $\check{H} = (\check{H}_1 + \check{H}_2)/2$.

The following hypotheses about the functions H_1 and H_2 will be assumed throughout the article: there exists some $\gamma > \check{H}$ such that

$$|H_i(t) - H_i(s)| \leq |t - s|^\gamma$$

for $i = 1, 2$ and $t, s \in [0, T]$.

Further we establish some continuity properties of the process X . We start with the following lemma, which provides continuity of the process Z^{H_1, H_2} in its parameters.

Lemma 1. For all $H_1, H'_1 \in [\hat{H}_1, \check{H}_1]$, $H_2, H'_2 \in [\hat{H}_2, \check{H}_2]$, $t \in [0, T]$

$$\mathbb{E} \left[(Y_t^{H_1, H_2} - Y_t^{H'_1, H'_2})^2 \right] \leq C \sum_{i=1}^2 (H_i - H'_i)^2.$$

Proof. Start by estimating

$$\begin{aligned} & \mathbb{E} \left[(Y_t^{H_1, H_2} - Y_t^{H'_1, H'_2})^2 \right] \\ & \leq 2 \left(\mathbb{E} \left[(Z_t^{H_1, H_2} - Y_t^{H'_1, H'_2})^2 \right] \right. \\ & \quad \left. + \mathbb{E} \left[(Z_t^{H'_1, H'_2} - Y_t^{H'_1, H'_2})^2 \right] \right). \end{aligned}$$

By symmetry, it is enough to show that

$$\mathbb{E} \left[(Y_t^{H_1, H_2} - Y_t^{H'_1, H'_2})^2 \right] \leq C(H_1 - H'_1)^2.$$

Denote

$$f_{H_1, H_2}(s, x, y) = (s - x)_+^{H_1/2-1} (s - y)_+^{H_2/2-1}.$$

Write

$$\begin{aligned} & \mathbb{E} \left[(Y_t^{H_1, H_2} - Y_t^{H'_1, H'_2})^2 \right] \\ & = \mathbb{E} \left[\left(\iint_{\mathbb{R}^2} \int_0^t \Delta(s, x, y) ds W(dx) W(dy) \right)^2 \right] \\ & = \iint_{\mathbb{R}^2} \left(\int_0^t \Delta(s, x, y) ds \right)^2 dx dy, \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} \Delta(s, x, y) &= K_{H_1, H_2}(s, x, y) - K_{H'_1, H'_2}(s, x, y) \\ &= \frac{1}{2} \int_{H'_1}^{H_1} (f_{h, H_2}(s, x, y) \log(s - x)_+ \\ & \quad + f_{H_2, h}(s, x, y) \log(s - y)_+) dh. \end{aligned}$$

Now take some $\varepsilon \in (0, (1 - \check{H}_1) \wedge (\hat{H}_1 - 1/2))$. Since $\log x \leq C(x^\varepsilon + x^{-\varepsilon})$, we can estimate

$$\begin{aligned} |\Delta(s, x, y)| &\leq C |H_1 - H'_1| (f_{\hat{H}_1 - \varepsilon, H_2} \\ & \quad + f_{\check{H}_1 + \varepsilon, H_2} + f_{H_2, \hat{H}_1 - \varepsilon} + f_{H_2, \check{H}_1 + \varepsilon})(s, x, y) \\ &= C |H_1 - H'_1| (K_{\hat{H}_1 - \varepsilon, H_2} + K_{\check{H}_1 + \varepsilon, H_2})(s, x, y). \end{aligned}$$

For any $H_1, H_2 \in (1/2, 1)$, $t \in [0, t]$, $x, y \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} & \iint_{\mathbb{R}^2} \left(\int_0^t K_{H_1, H_2}(s, x, y) ds \right)^2 dx dy \\ &= \mathbb{E} \left[(Y_t^{H_1, H_2})^2 \right] < \infty. \end{aligned}$$

moreover, this expression is continuous in H_1 and H_2 (see [4, Lemma 2.2]), hence, bounded for $H_2 \in [\hat{H}_2, \check{H}_2]$ and $H_1 \in \{\hat{H}_1 - \varepsilon, \check{H}_1 + \varepsilon\}$. Consequently,

$$\mathbb{E} \left[(Y_t^{H_1, H_2} - Y_t^{H'_1, H'_2})^2 \right] \leq C |H_1 - H'_1|,$$

as required. $\square$

Now we are able to formulate result about the generalized multifractional Rosenblatt process X .

Proposition 2. *There exist positive constants C_1 and C_2 such that for all $s, t \in [0, T]$ sufficiently close,*

$$\mathbb{E}[(X_t - X_s)^2] \geq C_1 |t - s|^{H_1(t) + H_2(t)}$$

and

$$\mathbb{E}[(X_t - X_s)^2] \leq C_2 |t - s|^{H_1(t) + H_2(t)}.$$

Consequently, for all $s, t \in [0, T]$

$$\mathbb{E}[(X_t - X_s)^2] \geq C'_1 |t - s|^{2\hat{H}}$$

and

$$\mathbb{E}[(X_t - X_s)^2] \leq C'_2 |t - s|^{2\hat{H}}$$

with some positive constants C'_1 and C'_2 .

Proof. From the self-similarity and stationary increments property of Y^{H_1, H_2} , we have

$$\mathbb{E}[(Y_t^{H_1, H_2} - Y_s^{H_1, H_2})^2] = K |t - s|^{H_1 + H_2}$$

with $K = \mathbb{E}[(Y_1^{H_1, H_2})^2]$.

For brevity, denote $Y^{\bar{H}(t)} = Y^{H_1(t), H_2(t)}$. Write

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[(X_t - X_s)^2] &= \mathbb{E}[(Y_t^{\bar{H}(t)} - Y_s^{\bar{H}(s)})^2] \leq \\ &2\mathbb{E}[(Y_t^{\bar{H}(t)} - Y_s^{\bar{H}(t)})^2] + 2\mathbb{E}[(Y_s^{\bar{H}(t)} - Y_s^{\bar{H}(s)})^2] \\ &= K |t - s|^{H_1(t) + H_2(t)} + \mathbb{E}[(Y_s^{\bar{H}(t)} - Y_s^{\bar{H}(s)})^2]. \end{aligned}$$

By Lemma 1,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[(Y_s^{\bar{H}(t)} - Y_s^{\bar{H}(s)})^2] &\leq C \sum_{i=1}^2 |H_i(t) - H_i(s)|^2 \\ &\leq C |t - s|^{2\gamma} = o(|t - s|^{2\hat{H}}), |t - s| \rightarrow 0, \end{aligned}$$

whence we derive the required statement. $\square$

As a corollary, we get Hölder continuity of the generalized multifractional Rosenblatt process.

Theorem 1. *For any $\alpha < \hat{H}$, the process X has a modification, which is Hölder continuous of order α .*

Proof. Using Proposition 2 and the estimate (4), we get

$$\mathbb{E}[(X_t - X_s)^m] \leq C |t - s|^{m\hat{H}}$$

for all $m \geq 1$. Taking $m > (\hat{H} - \alpha)^{-1}$, we obtain the statement from the Kolmogorov–Chentsov theorem. $\square$

3 Existence of local time for generalized Rosenblatt process

In this section we prove the existence of local time for both generalized Rosenblatt process and multifractional generalized Rosenblatt process.

Theorem 2. *For each $H_1, H_2 \in (1/2, 1)$, the process Y^{H_1, H_2} has a square integrable local time on $[0, T]$.*

Proof. By the Proposition 1 it is enough to check the condition (5) for $A = [0, T]$. Fix some $H_1, H_2 \in (1/2, 1)$ and abbreviate $Y = Y^{H_1, H_2}$, $H = (H_1 + H_2)/2$. Since Y is $(H_1 + H_2)/2$ -selfsimilar and has stationary increments,

$$\mathbb{E}[e^{iz(X_t - X_s)}] = \mathbb{E}[e^{izX_{|t-s|}}] = \mathbb{E}[e^{iz|t-s|^H X_1}].$$

We have $X_1 = I_2(\phi)$ with

$$\phi(x, y) = \int_0^1 K_{H_1, H_2}(s, x, y) ds.$$

Therefore, by (3)

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[e^{iz|t-s|^H X_1}] &= \mathbb{E}[e^{iz|t-s|^H I_2(\phi)}] \\ &\leq \left(1 + 64z^6 |t-s|^{6H} \lambda_{1,\phi}^2 \lambda_{2,\phi}^2 \lambda_{3,\phi}^2\right)^{-1/4}. \end{aligned}$$

Now we will prove that $\dim M_\phi L^2(\mathbb{R}) = \infty$. Take any $a > 0$ and set $f_a(x) = e^{ax} \mathbf{1}_{x \leq 1}$. For any $h > 0$,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} (s-y)_+^{h/2-1} f_a(y) dy &= e^{as} \int_0^\infty t^{h/2-1} e^{-at} dt \\ &= a^{-h/2} \Gamma(h/2) e^{as} =: c_{a,h} e^{as}. \end{aligned}$$

Therefore,

$$\begin{aligned} (M_\phi f_a)(x) &= \int_{\mathbb{R}} \int_0^1 K_{H_1, H_2}(s, x, y) f_a(y) dy = \\ &\int_0^1 (c_{a,H_1}(s-x)_+^{\alpha_1} + c_{a,H_2}(s-x)_+^{\alpha_2}) e^{as} ds, \end{aligned}$$

where $\alpha_i = H_i/2 - 1$, $i = 1, 2$. In particular, $(M_\phi f_a)(x)$ decays as $e^{ax} |x|^{\alpha_1 \vee \alpha_2}$ for $x \rightarrow -\infty$. Hence the claim $\dim M_\phi L^2(\mathbb{R}) = \infty$ follows obviously.

Consequently, $\lambda = \lambda_{1,\phi}^2 \lambda_{2,\phi}^2 \lambda_{3,\phi}^2 > 0$, and

$$\begin{aligned} &\int_{\mathbb{R}} \int_0^T \int_0^T \mathbb{E}[e^{iz(X_t - X_s)}] ds dt dz \\ &\leq \int_0^T \int_0^T \int_{\mathbb{R}} \left(1 + 64\lambda z^6 |t-s|^{6H}\right)^{-1/4} dz ds dt \\ &= \int_0^T \int_0^T \int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{(1 + \lambda z^6)^{1/4}} \frac{ds dt}{2|t-s|^H} < \infty, \end{aligned}$$

as required. $\square$

From this theorem we can deduce existence of local time for multifractional generalized process exactly the same way as [9, Theorem 3.2] is deduced from [9, Theorem 3.1]. Nevertheless, for completeness we present the proof.

Theorem 3. *The multifractional generalized Rosenblatt process X has a square integrable local time on $[0, T]$.*

Proof. In view of the additivity of the local time in A , it is enough to check the assumption (5) for $A = [s, t]$, with $t - s$ small enough.

To this end, denote $Y_t^{\bar{H}} = Y_t^{H_1, H_2}$,

$$f_{\bar{H}}(t, x, y) = \int_0^t K_{H_1, H_2}(u, x, y) du$$

and write

$$\begin{aligned} \left| \mathbb{E} \left[e^{iz(X_t - X_s)} \right] \right| &= \left| \mathbb{E} \left[e^{izI_2(g)} \right] \right| \\ &\leq (1 + 64z^6 \lambda_{1,g}^2 \lambda_{2,g}^2 \lambda_{3,g}^2)^{-1/4}, \end{aligned}$$

where $g(x, y) = f_{\bar{H}(t)}(t, x, y) - f_{\bar{H}(s)}(s, x, y)$ is the kernel corresponding to $X_t - X_s$. It can be represented as $g_1(x, y) + g_2(x, y)$, where

$$\begin{aligned} g_1(x, y) &= f_{\bar{H}(t)}(t, x, y) - f_{\bar{H}(t)}(s, x, y), \\ g_2(x, y) &= f_{\bar{H}(t)}(s, x, y) - f_{\bar{H}(s)}(s, x, y). \end{aligned}$$

Evidently,

$$|\lambda_{k,g}| \geq |\lambda_{k,g_1}| - \|M_{g_2}\| \geq |\lambda_{k,g_1}| - \|g_2\|. \quad (6)$$

It follows from Lemma 1 that $\|g_2\| \leq C(t-s)^\gamma$. On the other hand, $I_2(g_1) = Y_t^{\bar{H}(t)} - Y_s^{\bar{H}(t)}$ is distributed as $(t-s)^{H(t)} Y_1^{\bar{H}(t)}$ with $H(t) = (H_1(t) + H_2(t))/2$. Therefore,

$$\lambda_{k,g_1} = (t-s)^{H(t)} \lambda_{k, \phi_{\bar{H}(t)}} \geq C(t-s)^{\tilde{H}} \lambda_{k, \phi_{\bar{H}(t)}},$$

where $\phi_{\bar{H}(t)}$ is the kernel corresponding to $Y_1^{\bar{H}(t)}$.

From the proof of Theorem 2 it follows that $\lambda_{k, \phi_{H(t)}} > 0$, $k = 1, 2, 3$. In view of continuity, $\lambda_{k,g_1} \geq C(t-s)^{\tilde{H}}$ for $k = 1, 2, 3$. Since $|\lambda_{k,f_1} - \lambda_{k,f_2}| \leq \|f_1 - f_2\|$, then the estimates $\|g_2\| \leq C(t-s)^\gamma = o((t-s)^{\tilde{H}})$ with (6) yield $|\lambda_{k,g}| \geq C(t-s)^{\tilde{H}}$, $k = 1, 2, 3$, whenever $t-s$ is small enough. Thus,

$$\mathbb{E} \left[e^{iz(X_t - X_s)} \right] \leq \left(1 + Cz^6(t-s)^{6\tilde{H}} \right)^{-1/4},$$

and the rest of proof goes as for Theorem 2. $\square$

References

1. Benassi, A. Gaussian processes and pseudodifferential elliptic operators / A. Benassi, S. Jaffard, D. Roux // *Revista Mathematica Iberoamericana*. — 1997. — Vol. 13, no. 1. — P. 19–89.
2. Berman, S. Local nondeterminism and local times of Gaussian processes. / S.M. Berman // *Indiana Univ. Math. J.* — 1973. — V. 23. — P. 69–94.
3. Janson, S. Gaussian Hilbert spaces / S. Janson. — Cambridge: Cambridge University Press, 1997. — x+340 P.
4. Maejima, M. Selfsimilar processes with stationary increments in the second Wiener chaos / M. Maejima, C. A. Tudor // *Probab. Math. Statist.* — 2012. — V. 32, no. 1. — P. 167–186.
5. Nualart, D. The Malliavin calculus and related topics / D. Nualart. — Berlin: Springer-Verlag, 2006. — xiv+382 P.
6. Peltier, R. F. Multifractional Brownian motion: definition and preliminary results / R. F. Peltier, J. Lévy Véhel // *INRIA research report*. — 1995. — no. 2645.
7. Ralchenko, K. V. Path properties of multifractal Brownian motion / K. V. Ralchenko, G. M. Shevchenko // *Theor. Probability and Math. Statist.* — 2010. — V. 80. — P. 119–130.
8. Rosenblatt, M. Independence and dependence / M. Rosenblatt // *Proc. 4th Berkeley Symp. Math. Stat. Probab.* 2. — 1961. — P. 431–443.
9. Shevchenko, G. Properties of trajectories of a multifractional Rosenblatt process. / G. Shevchenko // *Theory Probab. Math. Stat.* — 2011. — V. 83. — P. 163–173.
10. Torres, S. Donsker type theorem for the Rosenblatt process and a binary market model. / S. Torres, C. A. Tudor // *Stochastic Anal. Appl.* — 2009. — V. 27, no. 3. — P. 555–573.

Received: 1.06.2013

УДК 517.5

О. О. Курченко¹, д.ф.-м.н., професор

Аналог сталої Ойлера для функції двох змінних

Для функції $f \in C([1, +\infty)^2)$ наведені умови збіжності двоіндексної послідовності

$$a_{nm} = \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m f(k, j) - \int_1^{n+1} du \int_1^{m+1} f(u, v) dv$$

до сталої при $n, m \rightarrow \infty$.

Ключові слова: збіжність, стала Ойлера.

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Володимирська, 64, e-mail: olkurchenko@ukr.net.

О. О. Kurchenko¹, D.Sci. (Phys.-Math.), Full Professor

Analogy of Euler constant for the function of two variables

The conditions on the function $f \in C([1, +\infty)^2)$ for the convergence of the two-index sequence

$$a_{nm} = \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m f(k, j) - \int_1^{n+1} du \int_1^{m+1} f(u, v) dv$$

to the constant as $n, m \rightarrow \infty$ are obtained.

Key Words: convergence, Euler constant.

¹National Taras Shevchenko University of Kyiv, 01033, Kyiv, vul.Volodymyrska, 64, e-mail: olkurchenko@ukr.net.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Козаченко Ю.В.

Вступ

Стала Ойлера визначається як границя різниці n -тої часткової суми гармонічного ряду та натурального логарифма n

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{n} - \ln n \right) = 0,577215 \dots$$

Цю сталу Леонард Ойлер отримав у 1735 році. Італійський математик Лоренцо Маскероні у 1790 році обчислив наближене значення цієї сталої з точністю до 10^{-32} . Стала Ойлера зустрічається в багатьох формулах математичного аналізу та його застосувань і належить до визначних математичних сталих. Актуальними є дослідження раціональних апроксимацій сталої Ойлера [1]. У роботі [2] методом зустрічних послідовностей доведена збіжність та оцінена швидкість збіжності послідовності

$$b_n = f(1) + f(2) + \dots + f(n) - \int_1^n f(u) du, \quad (1)$$

де $f(x), x \geq 1$ — неперервна і незростаюча на проміжку $[1, +\infty)$ збіжна до нуля при $x \rightarrow +\infty$ дійсна функція.

Для дійсної невід'ємної функції двох змінних $f(x, y), x, y \geq 1$, неперервної на множині визначення, розглянемо двоіндексну послідовність

$$a_{nm} = \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m f(k, j) - \int_1^{n+1} du \int_1^{m+1} f(u, v) dv, \quad (2)$$

$n, m \in \mathbb{N}$.

У цій статті наведені достатні умови збіжності двоіндексної послідовності (2). Отримані результати можуть бути застосовані для оцінки похибки наближення часткових сум подвійних рядів подвійними інтегралами.

Основна частина

Нехай дійсна функція двох змінних $f(x, y), x, y \geq 1$ неперервна на множині визначення. Для натуральних чисел k, j через $\omega_{kj}(f)$

позначимо коливання функції f на квадраті $[k, k+1] \times [j, j+1]$:

$$\omega_{kj}(f) = \sup_{k \leq x, s \leq k+1, j \leq y, t \leq j+1} |f(x, y) - f(s, t)|.$$

Теорема 1. Нехай для дійсної функції $f \in C([1, +\infty)^2)$ подвійний ряд

$$\sum_{k,j=1}^{\infty} \omega_{kj}(f) \quad (3)$$

збіжний. Тоді двоіндексна послідовність (2) має скінченну границю при $\gamma(f) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{n,m \rightarrow \infty} a_{nm}$.

Доведення. Для довільних натуральних чисел n, m маємо:

$$\begin{aligned} a_{nm} &= \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m f(k, j) - \int_1^{n+1} du \int_1^{m+1} f(u, v) dv = \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m \int_k^{k+1} du \int_j^{j+1} (f(k, j) - f(u, v)) dv. \end{aligned}$$

Таким чином, a_{nm} є частковою сумою подвійного ряду

$$\sum_{k,j=1}^{\infty} \int_k^{k+1} du \int_j^{j+1} (f(k, j) - f(u, v)) dv \quad (4)$$

Оскільки для довільних $k, j \geq 1$ справджується нерівність

$$\left| \int_k^{k+1} du \int_j^{j+1} (f(k, j) - f(u, v)) dv \right| \leq \omega_{kj}(f),$$

а ряд (3) збіжний, то подвійний ряд (4) збіжний, звідки випливає існування скінченної границі $\lim_{n,m \rightarrow \infty} a_{nm}$. Теорема доведена. $\square$

П р и к л а д. Нехай

$$f(x, y) = \frac{\cos \pi x \cos \pi y}{(x + y)^\alpha}; \quad x, y \geq 1$$

де $\alpha > 2$. Для довільних натуральних чисел k, j справджується нерівність $0 \leq \omega_{kj} \leq 2(k + j)^{-\alpha}$, а подвійний ряд

$$\sum_{k,j=1}^{\infty} (k + j)^{-\alpha}$$

збіжний. Тому подвійний ряд $\sum_{k,j=1}^{\infty} \omega_{kj}(f)$ збіжний і, внаслідок теореми 1, двоіндексна послідовність (2) збіжна.

Лема 1. Нехай двоіндексна послідовність (d_{nm}) неспадна (незростаюча) по кожному індексу при фіксованому іншому і обмежена зверху (знизу). Тоді ця послідовність має скінченну границю при $n, m \rightarrow \infty$.

Доведення. Розглянемо випадок неспадної по кожному індексу при фіксованому іншому і обмеженої зверху двоіндексної послідовності (d_{nm}) . Тоді послідовність (d_{nn}) неспадна і обмежена зверху. Тому існує скінченна границя

$$d = \lim_{n \rightarrow \infty} d_{nn}. \quad (5)$$

За означенням границі послідовності, для довільного $\varepsilon > 0$ існує $n_0 \in \mathbb{N}$ таке, що для всіх $n \geq n_0$ справджується ланцюжок нерівностей $d - \varepsilon < d_{nn} \leq d$. Внаслідок того, що послідовність (d_{nm}) неспадна по кожному індексу при фіксованому іншому, для довільних натуральних $n, m \geq n_0$ при $m \geq n$ маємо

$$d - \varepsilon < d_{nn} \leq d_{nm} \leq d_{mm} \leq d.$$

Отже, $\lim_{n,m \rightarrow \infty} d_{nm} = d$. Випадок незростаючої по кожному індексу при фіксованому іншому і обмеженої знизу двоіндексної послідовності розглядається аналогічно. Лема доведена. $\square$

Теорема 2. Нехай невід'ємна неперервна на множині визначення функція $f(x, y); x, y \geq 1$ задовольняє такі умови:

- 1) функція f незростаюча по кожній змінній при фіксованій іншій;
- 2) ряди $\sum_{k=1}^{\infty} f(k, 1), \sum_{j=1}^{\infty} f(1, j)$ збіжні.

Тоді двоіндексна послідовність (2) збіжна.

Доведення. Доведемо, що двоіндексна послідовність (2) неспадна по кожному індексу при фіксованому іншому. Для довільних натуральних чисел n, m маємо:

$$a_{(n+1)m} - a_{nm} = \sum_{j=1}^m f(n+1, j) -$$

$$\int_{n+1}^{n+2} dx \int_1^{m+1} f(x, y) dy =$$

$$= \sum_{j=1}^m \int_{n+1}^{n+2} dx \int_j^{j+1} (f(n+1, j) - f(x, y)) dy \geq 0,$$

оскільки для довільної точки $(x, y) \in [n+1, n+2] \times [j, j+1]$ справджується нерівність $f(n+1, j) \geq f(x, y)$. Аналогічно, $a_{n(m+1)} - a_{nm} \geq 0$. Встановимо обмеженість зверху послідовності (2). Для довільних натуральних чисел n, m маємо:

$$\begin{aligned} a_{nm} &= \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m \int_k^{k+1} dx \int_j^{j+1} (f(k, j) - f(x, y)) dy \\ &\leq \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m (f(k, j) - f(k+1, j+1)) = \\ &= \sum_{k=2}^n \left((f(k, 1) - f(k, m+1)) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=2}^m (f(1, j) - f(n+1, j)) \right) + f(1, 1) - \\ &\quad - f(n+1, m+1) \leq \sum_{k=1}^{\infty} f(k, 1) + \sum_{j=1}^{\infty} f(1, j), \end{aligned}$$

звідки завдяки умові 2) впливає обмеженість зверху двоіндексної послідовності (2). Внаслідок леми 1, послідовність (2) збіжна. Теорема доведена. $\square$

П р и к л а д. Функція

$$f(x, y) = \frac{1}{(x+y)^2}; \quad x, y \geq 1$$

задовольняє умови теореми 2. Внаслідок цієї теореми, двоіндексна послідовність

$$\begin{aligned} a_{nm} &= \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m (k+j)^{-2} - \int_1^{n+1} dx \int_1^{m+1} (x+y)^{-2} dy \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m (k+j)^{-2} - \ln \frac{(n+2)(m+2)}{2(n+m+2)} \end{aligned}$$

збіжна.

П р и к л а д. Функція

$$f(x, y) = \frac{1}{(x+y)^{\alpha}}; \quad x, y \geq 1,$$

де параметр $\alpha > 1, \alpha \neq 2$, задовольняє умови теореми 2. Внаслідок цієї теореми, двоіндексна послідовність

$$\begin{aligned} a_{nm} &= \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m (k+j)^{-\alpha} - \int_1^{n+1} dx \int_1^{m+1} (x+y)^{-\alpha} dy \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m (k+j)^{-\alpha} - \frac{1}{(2-\alpha)(1-\alpha)} \times \\ &\quad \times \left((n+m+2)^{2-\alpha} - (m+2)^{2-\alpha} - \right. \\ &\quad \left. - (n+2)^{2-\alpha} + 2^{2-\alpha} \right) \end{aligned}$$

збіжна. Границю цієї послідовності позначимо через $c(\alpha)$. Цікаво дослідити функцію $c(\alpha)$, $\alpha > 1$.

Висновки

Для функції двох змінних $f(x, y)$, $x, y \geq 1$, монотонної по кожній змінній при фіксованій іншій, знайдені умови збіжності двоіндексної послідовності (2) до сталої при $n, m \rightarrow \infty$, що є аналогом збіжності послідовності (1) у випадку функції однієї змінної.

Отримані результати можуть бути застосовані для оцінки похибки наближення часткових сум подвійних рядів подвійними інтегралами.

Список використаних джерел

1. Рациональные приближения постоянной Эйлера и рекуррентные соотношения, Сборник статей, Совр. пробл. Матем., 9, ред. А.И.Аптекарев, МИАН, М. 2007, 84 с.
2. Курченко О.О. Аналог сталої Ойлера для монотонної, збіжної до нуля функції / О. О. Курченко // Вісник Київського національного університету ім. Тараса Шевченка, сер. фізико-математичні науки. – 2011. – Вип. 4– С.26-29.

Надійшла до редколегії 28.02.2013

**ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ
РІВНЯННЯ,
МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА
ТА МЕХАНІКА**

УДК 539.9

Lavrenyuk M.V.¹, PhD.

The stress-strain state of plate containing elliptic multicoated inclusion under non-uniformly distributed loading.

Modified boundary element method (MBEM) has been proposed, to solve the problem of defining stress-strain state of plate with elliptic multicoated inclusion under non-uniformly distributed loading. Modification allows simultaneous defining of all components of stress-strain state on the boundary of inclusion and each layer by means of using two-dimensional approximation of displacements and stresses on every element of discretization. The approach exposed allows generalization for the cases of inclusion of an arbitrary shape, the pair of interacting multicoated inclusions, etc. The numerical examples presented demonstrate high accuracy as well as numerical efficiency of the MBEM.

Key words: multicoated inclusion, BEM, layer.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4e,
e-mail: mykolalav@ukr.net

М. В. Лавренюк¹, к. ф.-м. н.

Напружено-деформований стан пластини з еліптичним багатошаровим включенням під дією нерівномірно розподіленого навантаження.

Запропоновано модифікований метод граничних елементів (ММГЕ) для розв'язання задачі визначення напружено-деформованого стану пластини з багатошаровим включенням еліптичної форми під дією нерівномірно розподіленого навантаження. Модифікація методу дозволяє визначати одночасно всі компоненти напружено-деформованого стану на границі включення та кожного шару за допомогою двовимірної апроксимації складових вектора переміщень та тензора напружень на кожному елементі дискретизації. Запропонований підхід можна узагальнити на випадок включення довільної форми, пари взаємодіючих багатошарових включень, тощо. Наведені результати чисельного розрахунку вказують на високу точність та ефективність ММГЕ.

Ключові слова: шар, включення, метод граничних елементів.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4е, e-mail: mykolalav@ukr.net

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Маципура В.Т.

Introduction

There is a steady trend to use composites instead of casual mono-component materials in vast majority of modern technologies especially in aerospace, automotive, and civil engineering. Composites usually consist of number of materials that are combined to form a new material that exhibits desired properties. Such composites can be often presented as matrix with multicoated fibers. If the surface load and the stress field do not vary in fiber direction, the problem can be simplified and considered as two-dimensional elasticity problem, namely, as an elastic plane containing multicoated inclusions. The form of multicoated inclusions influences significantly on the resulting stresses field in the composite. To solve such kind of problems

conventional computational methods with boundary (BEM [1]) discretizations are usually [2] — [4] used.

The approach that utilizes two-dimensional approximation of displacements on the boundary of inclusions [5] allows to define simultaneously all the components of stress-strain state on the boundary of inclusion and each layer. Let us consider the problem of elastic equilibrium of space containing elliptic multicoated single fiber given that considered composite is subjected to action of non-uniformly distributed loading. The author's contribution to related problems can be found for example in [6], [7]. Also, in authors PhD theses the problem of defining stress-strain state of inclusion with single coating in elastic plane was considered. In the last section of paper, the results of numerical investigation are presented and possible ways to

improve computational efficiency of the method are discussed.

Statement of the problem

Let us consider infinite plane with multicoated inclusion in it. On the infinity distributed forces p_i are applied. Besides, on the infinity body is also subjected to the action of mass load X .

The system of equilibrium equations can be written down as follows:

$$\begin{cases} \left(\lambda_0 u_{i,j} \delta_{ij} + \mu_0 (u_{i,j} + u_{j,i}) \right)_{,j} + X_i = 0 \\ \left(\lambda_p u_{i,j} \delta_{ij} + \mu_p (u_{i,j} + u_{j,i}) \right)_{,j} + X_i = 0 \end{cases} \quad (1)$$

$$i, j = 1, 2, \quad p = 1, \dots, N$$

The perfect mechanical contact conditions on the edge of each layer have the form:

$$\sigma_{ij}^p n_j^p|_{\Gamma_p} = \sigma_{ij}^{p+1} n_j^{p+1}|_{\Gamma_p}, \quad u_i^p|_{\Gamma_p} = u_i^{p+1}|_{\Gamma_p}, \quad (2)$$

$$i, j = 1, 2, \quad p = 1, \dots, N$$

Multiplying both parts of each equation (1) on the correspondent fundamental solutions $U_i^{k(0)}$ and $U_i^{k(p)}$, $p = 1, \dots, N$ and integrating over the domains of matrix, inclusion and layers, we have for matrix

$$\begin{aligned} & \int_{S_0 \setminus S_1} \left(\mu_0 u_{i,j} \delta_{ij} + \mu_0 (u_{i,j} + u_{j,i}) \right)_{,j} U_i^{k(0)} dS - \\ & - \int_{S_0 \setminus S_1} X_i U_i^{k(0)} dS = 0, \end{aligned}$$

for every layer

$$\int_{S_p \setminus S_{p+1}} \left(\mu_p u_{i,j} \delta_{ij} + \mu_p (u_{i,j} + u_{j,i}) \right)_{,j} U_i^{k(p)} dS_p = 0,$$

and for inclusion domain

$$\int_{S_N} \left(\mu_N u_{i,j} \delta_{ij} + \mu_N (u_{i,j} + u_{j,i}) \right)_{,j} U_i^{k(N)} dS_N = 0.$$

Finally we obtain Somigliana identity for plane:

$$\begin{aligned} \chi(S) u_k^{(0)}(\xi) &= \int_{\Gamma_1} \sigma_{ij}^{(0)} n_j^{(1)} U_i^{k(0)} d\Gamma_1 - \int_{\Gamma_1} g_i^{k(0)} u_i d\Gamma_1 + \\ &+ \int_{S_0 \setminus S_1} X_i U_i^{k(0)} dS, \quad \chi = \begin{cases} 1, \xi \in S_0 \setminus S_1 \\ 0, \xi \notin S_0 \setminus S_1 \end{cases} \end{aligned} \quad (3)$$

for each layer:

$$\begin{aligned} \chi(S) u_k^{(p)}(\xi) &= \int_{\Gamma_{p+1}} \sigma_{ij}^{(p)} n_j^{(p)} U_i^{k(p)} d\Gamma_{p+1} - \\ &- \int_{\Gamma_p} g_i^{k(p)} u_i d\Gamma_p - \int_{\Gamma_{p+1}} g_i^{k(p)} u_i d\Gamma_{p+1} + \\ &+ \int_{\Gamma_p} \sigma_{ij}^{(p)} n_j^{(p)} U_i^{k(p)} d\Gamma, \quad \chi = \begin{cases} 1, \xi \in S_p \setminus S_{p+1} \\ 0, \xi \notin S_p \setminus S_{p+1} \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

and for inclusion:

$$\begin{aligned} \chi(S) u_k^{(N)}(\xi) &= \int_{\Gamma_N} \sigma_{ij} n_j U_i^{k(N)} d\Gamma_N - \\ &- \int_{\Gamma_N} g_i^{k(N)} u_i d\Gamma_N, \quad \chi = \begin{cases} 1, \xi \in S_N \\ 0, \xi \notin S_N \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

Let us discretize the contours of inclusion and layers using segments as elements of discretization and work in on these segments local coordinates system. Let us carry out passage in integral representations, and direct (for every equation) the observation point step-by-step to the center of every segment of discretization. Thus we obtain the system of boundary integral equations for matrix:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \delta_{kj} u_j^{(0)}(x) - u_k^\infty &= \int_{S_0} X_i U_i^{k(0)} dS_0 + \int_{\Gamma_1} u_i^{(0)} g_i^{k(0)} d\Gamma_1 - \\ &- \int_{\Gamma_1} U_i^{k(0)}(x, \xi) \sigma_{ij}^{(0)} n_j^{(0)} d\Gamma_1, \quad x \in S_0 \setminus S_1, \end{aligned} \quad (6)$$

for every layer:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \delta_{kj} u_j^{(p)}(x) &= \int_{\Gamma_p} U_i^{k(p)}(x, \xi) \sigma_{ij}^{(p)} n_j^{(p)} d\Gamma_p - \\ &- \int_{\Gamma_p} u_i^{(p)} g_i^{k(p)} d\Gamma_p, \quad x \in S_p \setminus S_{p+1}, \quad p = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (7)$$

and for inclusion:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \delta_{kj} u_j^{(N+1)}(x) &= \int_{\Gamma_{N+1}} U_i^{k(N+1)}(x, \xi) \sigma_{ij}^{(N+1)} n_j^{(N+1)} d\Gamma_{N+1} - \\ &- \int_{\Gamma_{N+1}} u_i^{(N+1)} g_i^{k(N+1)} d\Gamma_{N+1}, \quad x \in S_N, \end{aligned} \quad (8)$$

Then, unknown densities of potentials of double layer on the boundaries of inclusions can be represented as functions of two unknowns along the segments of discretization. Such representation allows after solving the system of boundary integral equations to define all the components of both displacements and stresses σ_{ij} on the boundary of inclusion and every layer. In the case of linear approximation displacements on every segment of discretization can be written as follows:

$$\begin{aligned} u_1^{i(p)}(x') &= a_{1i}^p x'_1 + a_{2i}^p x'_2 + a_{3i}^p, \\ u_2^{i(p)}(x') &= a_{4i}^p x'_1 + a_{5i}^p x'_2 + a_{6i}^p, \\ p &= 1, \dots, N, i = 1, \dots, M_p. \end{aligned} \quad (9)$$

Using Hooke's law, we get correspondent expression for σ_{ij} on every segment of discretization:

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^{i(p)}(x') &= (\lambda_p + 2\mu_p) a_{1i}^p + \lambda_p a_{5i}^p \\ \sigma_{22}^{i(p)}(x') &= (\lambda_p + 2\mu_p) a_{5i}^p + \lambda_p a_{1i}^p \\ \sigma_{12}^{i(p)}(x') &= \mu_p (a_{2i}^p + a_{4i}^p), \quad p = 1, \dots, N, i = 1, \dots, M_p. \end{aligned} \quad (10)$$

It is obvious, that in considered case of linear approximation the components of tensor σ_{ij} will be constant along each segment of integration. After substituting the expressions for displacements (9) and stresses (10) into boundary integral equations (6)-(8), and contact conditions (2) we have the system of linear algebraic equations, which must be made closed by adding to system the equations of continuity of displacements on every segment of discretization, that have the following form:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(a_{1i}^p d_i^p + a_{3i}^p) \cos \alpha_i^p - \left(\frac{1}{2} a_{4i}^p d_i^p + a_{6i}^p \right) \sin \alpha_i^p = \\ & = \left(-\frac{1}{2} a_{1i+1}^p d_{i+1}^p + a_{3i+1}^p \right) \cos \alpha_{i+1}^p - \\ & - \left(-\frac{1}{2} a_{4i+1}^p d_{i+1}^p + a_{6i+1}^p \right) \sin \alpha_{i+1}^p, \\ & \left(\frac{1}{2} a_{1i}^p d_i^p + a_{3i}^p \right) \sin \alpha_i^p + \left(\frac{1}{2} a_{4i}^p d_i^p + a_{6i}^p \right) \cos \alpha_i^p = \\ & = \left(-\frac{1}{2} a_{1i+1}^p d_{i+1}^p + a_{3i+1}^p \right) \sin \alpha_{i+1}^p + \\ & + \left(-\frac{1}{2} a_{4i+1}^p d_{i+1}^p + a_{6i+1}^p \right) \cos \alpha_{i+1}^p, \\ & p = 0, \dots, N, i = 1, \dots, M_p \end{aligned}$$

Here d_i^p is the length of i -th segment of p -th layer, M_p — the number of segments on p -th inclusion, and α_i^p — the angle at normal of i -th segment of p -th layer with respect to OX of global coordinates system. So we have the closed system of linear algebraic equations, which produce as solution vector the unknown coefficients of approximation (9) or (10), and thus, all the components σ_{ij} and displacements on the contours of matrix and inclusions. Let us change the coordinate system to local for every discretization system, and change the densities of potentials on their expression using (9) and (10). Further using Somigliano formulas (3)-(5), we define displacements, and differentiating these formulas, also deformations. Then, on the base of Hooke's law we can define stresses in every internal point of the plane. In doing so the elastic problem is solved.

Numerical results

The number of numerical examples to evaluate stress state of examined bodies, especially stress concentration for composites with multicoated fibers are considered here. The influence of non-

homogeneous character of boundary loading, geometrical characteristic of elliptic inclusion ($a:b$ ratio), physical parameters of material and geometrical parameters of layers coating inclusion (thickness of layers h_i) on the stress concentration on the contour of inclusion is studied.

In all solved problems the finite plate is subjected to unilateral loading in vertical direction (along the axis OY). All results are obtained with respect to the value $P = \int_A^B p(x_1) dx_1$ of distributed force. There was considered the series of polynomial functions $p(x_1)$, namely functions which have the form: $p(x_1) = ax_1^k, k = 0, \dots, \infty$. At $k = 0$ we have the case of uniformly distributed loading. The coefficient a is defined from condition $\int_A^B ax_1^k dx_1 = p \cdot AB$. Let length of $AB = l$, then we have:

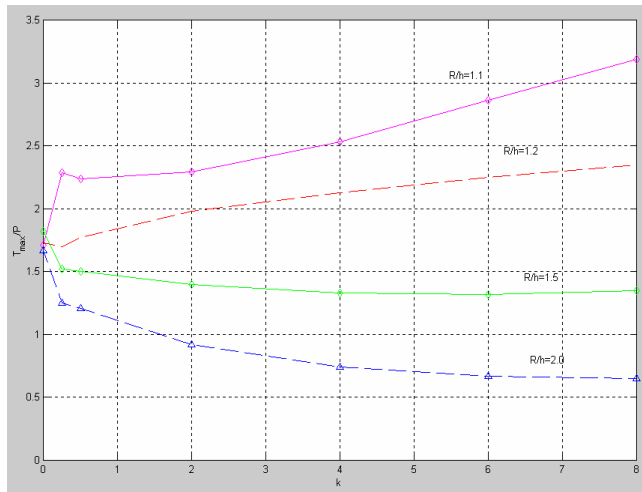
$$a = \frac{pl}{\int_0^l x_1^k dx_1} = \frac{(k+1)pl}{x_1^{k+1}} \Big|_0^l = \frac{(k+1)p}{l^k} \quad \text{and thus}$$

$$p(x_1) = (k+1)p \left(\frac{x_1}{l} \right)^k, k = 0, \dots, \infty \quad (11)$$

There were considered cases of elliptic inclusion in finite matrix with 1, 2, 4 layers of different thickness, having different physical characteristics. The shape of inclusions were considered to be elliptic with variety of ratio $a:b$.

The stress concentration for various problems presented in graphical form on sketches 1 and 2. As we see on graphs, the behavior of maximal intensity of stresses function greatly depends on such parameters as layer thickness and, what is more important on the form of loading function, namely the coefficient k of polynomial expansion (11).

To provide the desired accuracy at high rates of $a:b$ and low thickness h of coating layers it is necessary to increase the number of discretized elements on the contour of inclusion, the less the thickness (or the greater $a:b$), the bigger this number must be. In other words, we must satisfy $d_{el} \leq \min\{h_i\}$ condition. Let us estimate roughly the value d_{el} — the average size of discretization element, for $R_{incl} = 1$, N_{incl} being the number of segments on contour of inclusion. For circular inclusion we have $d_{el} = \frac{2\pi R_{incl}}{N_{incl}} \approx \frac{3R_{incl}}{N_{incl}}$. So, if we



Graph 1. Maximal intensity of stresses at different R/h and k

want to consider problem with $h = 0.01$ and $R_{incl} = 1$ we must guarantee that $N_{incl} \geq 300$.

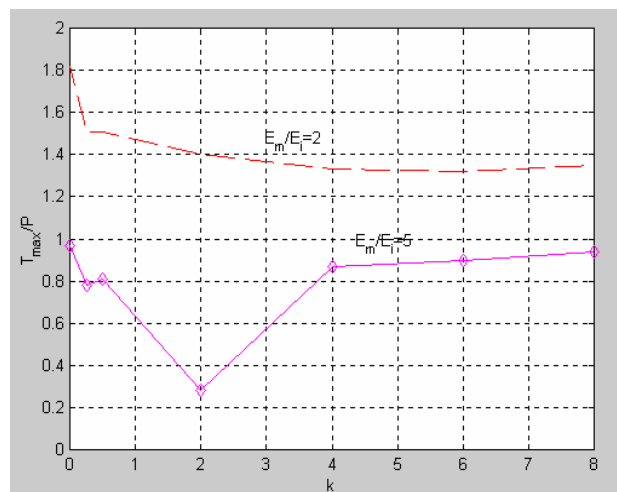
Conclusions

An highly accurate modification of boundary element method has been used to solve the problem of defining stress-strain state of plane with multicoated inclusion of elliptical shape, subjected to non-uniformly distributed loading.

It was ascertained there are three aspects influencing the level of stresses concentration on the contour of coated inclusion, namely the thickness of layer (ratio $h_i : R_{incl}$), the ratio $a : b$ of elliptical inclusion and the difference of mechanical characteristics of matrix, layers and inclusion

References

1. Brebbia K., Telles J., Wrobel L. Boundary element techniques: Theory and applications in engineering. – Berlin: Springer-Verlag, 1984. – 464 p.
2. Hyer M. W. Stress Analysis of Fiber-Reinforced Composite Materials. – DEStech Publications, Inc. 2009. – 695 p.
3. Bouyge F., Jasuik I., Ostoja-Starzewski M. A Micromechanically Based Couple-Stress Model of An Elastic Two-Phase Composite // International Journal of Solids and Structures. Elsevier Science Publishing Company, 2001. – 38, 10 – 13. – P. 1721 – 1735.
4. Vasanth S Kothnur, Subrata Mukherjee, Yu Xie Mukherjee. Two-dimensional linear elasticity by the boundary node method // International



Graph 2. Maximal intensity of stresses at different E_m/E_i and k

($E_0 : E_i : E_{incl}$). Besides, the character of loading function $p(x_1)$ also significantly (up to 30% for considered cases) influences the stress concentration values.

The problem can be generalized to problem of multicoated inclusion of an arbitrary shape in finite or infinite plate and pair of two interacting multicoated inclusions in plate. The proposed approach exhibits both high accuracy and numerical efficiency and thus can be effectively used for solving the problems of stress-strain state for the variety of composite materials, containing multicoated fibers.

Journal of Solids and Structures, 1999, 36, P. 1129-1147.

5. Lavrenyuk V.I. On the assessment of stress-strain state of matrix with inclusion using BEM // Visn., Ser. Fiz.-Mat. Nayky, Ky'iv Univ. im. Tarasa Shevchenka. – 1993. – N 2. – P. 27-35. (in Ukrainian)
6. Lavrenyuk M.V. Investigation of influence of contact conditions on stress-strain state of infinite elastic plate with two elliptical inclusions // Visn., Ser. Fiz.-Mat. Nayky, Ky'iv Univ. im. Tarasa Shevchenka. – 1998. – N 2. – P. 63-69. (in Ukrainian)
7. Lavrenyuk M.V. Analysis of stress-strain state of infinite elastic plate with rectangular inclusions at ideal and nonideal contact conditions // Visn., Ser. Fiz.-Mat. Nayky, Ky'iv Univ. im. Tarasa Shevchenka. – 1998. – N 4. – P. 17-26. (in Ukrainian)

Received on 25.09.13

УДК 517.95:519.63

Вакал Ю.Є.¹, к.ф.-м.н.

Дослідження руху забруднень з урахуванням процесу сорбції

Розглянута неусталена просторова міграція забруднень. Описана математична модель переносу забруднювача за наявності процесу сорбції. На основі методу скінченних різниць розроблено та реалізовано алгоритм чисельного розв'язку крайових задач. Досліджено вплив процесу сорбції на кінетику забруднювача.

Ключові слова: забруднення, сорбція, різницеві схеми, метод Ньютона – ПВР.

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова, 4д, e-mail: iuliia.vakal@gmail.com

Yu. E. Vakal¹, Ph.D.

The study of pollution transfer taking into account the sorption process

Unsteady spatial migration of pollutions is considered. Mathematical model of pollutant transfer in the presence of the sorption process is described. Based on finite difference algorithm for the numerical solution of boundary value problems is developed and implemented. The impact of sorption on the pollutant kinetics is investigated.

Key Words: pollution, sorption, difference schemes, Newton – SOR method.

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: iuliia.vakal@gmail.com

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

1. Вступ

У зв'язку з техногенними впливами на навколишнє середовище значну загрозу підземним водам несуть забруднення різного характеру. Внаслідок забруднень територій знижується якість підземних вод, стає неможливим їх використання для потреб народного господарства. Оскільки в ґрунті відбувається рух підземних вод і дифузія забруднювача, цей процес може поширюватися на значні відстані від джерел забруднення. Разом з тим рух забрудненої води супроводжується її очисткою внаслідок випадання забруднень на частинки породи – сорбції забруднювача. Оскільки процес сорбції є зворотним, за рахунок десорбції забруднюючих речовин може відбуватися повторне забруднення підземних вод при зміні зовнішніх умов, зокрема внаслідок діяльності людини. В зв'язку з цим при дослідженні процесів переносу розчинених речовин при фільтрації у ґрунті необхідно приділяти значну увагу впливу процесу сорбції на міграцію і кінетику забруднень.

2. Постановка задачі

Розглянемо область Ω прямокутної форми $\Omega = \{0 \leq x_1 \leq l_1, 0 \leq x_2 \leq l_2\}$. Через її границю поступає потік підземних вод, викликаний зовнішніми причинами, який рухається всередину області. Вважаємо, що в момент часу $t=0$ відбувається

викид забруднюючих речовин на відрізок $\{x_1=0, 0 < x_2 \leq b < l_2\}$, який назовемо зоною викиду забруднень. Надалі це джерело забруднень діє на вказаній ділянці із заданою інтенсивністю. Поток підземних вод забруднення зносяться в область Ω . Разом з конвекцією відбувається дифузія забруднювача. На відміну від [1, 7], будемо враховувати дифузію в напрямку x_1 . Прямокутник, однією з сторін якого є зона викиду, назовемо конвективним слідом зони викиду [7].

В зоні забруднень виникає і поширюється змінне в часі поле концентрацій забруднюючих речовин, які знаходяться у воді між частинками породи у вільному стані (в розчині). Паралельно формується й поле концентрацій сорбованих ґрунтом забруднень. При математичному моделюванні руху забруднень будемо враховувати:

- неусталений характер руху забруднень,
- динаміку вільного забруднювача в воді (процес розчину),
- динаміку забруднювача, сорбованого на частинках породи;
- характер процесу сорбції, зумовлений конкретним видом ґрунту та забруднювача.

Позначимо через $u(x, t)$ напір рідини, $k(x, u)$ – коефіцієнт вологопровідності, $\theta(x, u)$ – об'ємну вологість (пористість m у зоні повного насичення), $c(x, t)$ – концентрацію забруднень, які знаходяться між частинками породи у вільному розчині, $N(x, t)$ – концентрацію сорбованих забруднюючих

речовин, $\tilde{c}(x, t)$ – рівноважну концентрацію, що характеризує рухому динамічну рівновагу процесів сорбції та десорбції.

Систему рівнянь, що описують процес міграції забруднень в області Ω , розглянемо у вигляді [2, 3]

$$\frac{\partial \theta(x, u)}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(k(x, u) \frac{\partial u}{\partial x_{\alpha}} \right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\theta c)}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(D_{\alpha} \frac{\partial c}{\partial x_{\alpha}} \right) - \sum_{\alpha=1}^2 \frac{\partial (c v_{\alpha})}{\partial x_{\alpha}} - \varphi, \quad (2)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \varphi, \quad (3)$$

$$\tilde{c} = g(N), \quad (4)$$

де $v_{\alpha} = -k(x, u) \frac{\partial u}{\partial x_{\alpha}}$ – компоненти вектора швидкості вологопереносу.

Рівняння Річардса (1) моделює рух води одночасно у зонах повного і неповного насичення без явного виділення ліній поділу, (2) описує конвективний і дифузійний перенос забруднювача, (3) задає кінетику сорбції забруднювача в пористому середовищі, ізотерму сорбції, що описує рівноважний стан процесу сорбції, характеризує рівняння (4).

3. Метод розв'язання задачі

Розв'язання крайових задач для рівнянь (1), (2) здійснюється методом скінчених різниць [4]. Різницеві схеми, які апроксимують задачу міграції на нерівномірній сітці $\overline{\omega}_{h_1} \times \overline{\omega}_{h_2} \times \overline{\omega}_{\tau}$, де $\overline{\omega}_{h_1} = \{x_{li} \in [0, l_1], x_{li} = x_{li-1} + h_{li}^-, i = \overline{1, N_1}, x_{10} = 0, x_{1N_1} = l_1\}$, $\overline{\omega}_{h_2} = \{x_{2j} \in [0, l_2], x_{2j} = x_{2j-1} + h_{2j}^-, j = \overline{1, N_2}, x_{20} = 0, x_{2N_2} = l_2\}$, $\overline{\omega}_{\tau} = \{t_k \in [0, T], t_k = t_{k-1} + \tau, k = \overline{1, N_0}, t_0 = 0, t_{N_0} = T\}$, у внутрішніх вузлах області мають вигляд [8, 9]

$$Q_i(y) = \sum_{\alpha=1}^2 \left(a_{\alpha}(y) y_{\bar{x}_{\alpha}} \right)_{\bar{x}_{\alpha}}, \quad (5)$$

$$Q w_i = \sum_{\alpha=1}^2 \left(r_{\alpha} \left(d_{\alpha} w_{\bar{x}_{\alpha}} \right)_{\bar{x}_{\alpha}} + b_{\alpha}^+ d_{\alpha}^+ w_{x_{\alpha}} + b_{\alpha}^- d_{\alpha}^- w_{\bar{x}_{\alpha}} \right) - \tilde{\varphi}. \quad (6)$$

Тут сіткові функції Q , y , a_1 , a_2 , w , $\tilde{\varphi}$, d_1 , d_2 є різницевиими аналогами функцій θ , u , k , c , φ , D_1 ,

$$D_2; \quad b_{\alpha}^{\pm} = \frac{v_{\alpha}^{\pm}}{D_{\alpha}}, \quad r_{\alpha} = \frac{1}{1 + R_{\alpha}}, \quad R_{\alpha} = \frac{h_{\alpha}^+ v_{\alpha}^+ - h_{\alpha}^- v_{\alpha}^-}{2 D_{\alpha}} -$$

аналог різницевого числа Рейнольдса на нерівномірній сітці. На рівномірній сітці

$$R_{\alpha} = \frac{h_{\alpha} |v_{\alpha}|}{2 D_{\alpha}} \quad \text{і схема (6) збігається з монотонною}$$

схемою А.А.Самарського [4].

Звичайне диференціальне рівняння (3) апроксимується різницевиим

$$N_i = \tilde{\varphi}, \quad (7)$$

а рівняння (4) –

$$\tilde{c} = g(N). \quad (8)$$

Схеми (5), (6) апроксимують диференціальні задачі з першим порядком за просторовими і часовою змінними.

Побудовані різницеві схеми представляють собою системи нелінійних рівнянь. Подамо їх у вигляді операторного рівняння

$$F(Y) = 0, \quad (9)$$

де F – деяке нелінійне відображення у скінченновимірному просторі.

Позначимо Y^s деяке наближення до розв'язку рівняння (9). Тоді відповідно до методу Ньютона наступне наближення знаходиться як розв'язок лінійної системи

$$F'(Y^s)Y = F'(Y^s)Y^s - F(Y^s). \quad (10)$$

Позначаючи $A = F'(Y^s)$, $B = F'(Y^s)Y^s - F(Y^s)$, перепишемо систему так:

$$AY = B, \quad (11)$$

де A – лінійний оператор, визначений матрицею Якобі частинних похідних компонент відображення F .

Подамо матрицю A у вигляді

$$A = P - L - U, \quad (12)$$

де P, L, U – відповідно діагональна, строго нижня трикутна і строго верхня трикутна матриці.

Застосуємо до розв'язання системи (11) з урахуванням (12) метод послідовної верхньої релаксації (ПВР) [5]:

$$Y^{s+1} = Y^s - \omega(P - \omega L)^{-1}(AY^s - B), \quad s = 0, 1, 2, \dots, \quad (13)$$

де Y^0 – деяке початкове наближення до розв'язку системи (11), ω – релаксаційний параметр. Враховуючи позначення для A і B , однокроковий складений метод Ньютона – ПВР запишемо у наступному вигляді

$$Y^{s+1} = Y^s - \omega(P - \omega L)^{-1}F(Y^s)$$

або

$$(P - \omega L)Y^{s+1} = (P - \omega L)Y^s - F(Y^s). \quad (14)$$

Для розв'язання рівняння (7) застосовується метод Ейлера

$$N = \tilde{N} + \tau \tilde{\varphi}. \quad (15)$$

4. Результати чисельних розрахунків

Розроблені чисельні алгоритми застосовано до розв'язання задачі руху забруднень для лінійної ізотерми Генрі. В області малих концентрацій забруднювача функція g у рівнянні рівноваги (4) вибирається у вигляді [6]

$$g(N) = \frac{1}{\Gamma} N = \gamma N,$$

де Γ – коефіцієнт Генрі. Функцію φ у рівняннях (2), (3) покладемо у вигляді $\varphi = \beta(c - \tilde{c})$, де β – кінетичний коефіцієнт, який залежить від властивостей середовища та забруднювача і визначає швидкість обміну між речовинами, що знаходяться у розчині і затримуються ґрунтом внаслідок сорбції. Здійснено порівняння отриманого розв'язку з результатами роботи [7], для чого граничні умови для рівняння (1) вибирались так, щоб забезпечити надходження фільтраційного потоку через ліву границю і знесення ним забруднень в напрямку осі x_1 із швидкістю фільтрації v_1 . На лівій межі області Ω задавалась концентрація вільного забруднювача як функція часу t . Вважалося, що речовина не поступає в область через верхню і нижню границі. На правій границі задавалась умова відсутності концентрації забруднювача. В початковий момент часу концентрація вільного і сорбованого забруднювача в області приймалась рівною нулю. Чисельне розв'язування задачі здійснювалося до моменту часу, рівного 21 доба, при змінних початкових умовах в зоні викиду $\{x_1=0, 0 < a \leq x_2 \leq b < l_2\}$

$$c = \begin{cases} 1, & 0 \leq t \leq 18, \\ -\frac{1}{3}t + 7, & 18 \leq t \leq 21. \end{cases}$$

Приймалися такі значення параметрів і коефіцієнтів рівнянь: $l_1=2.5$ м, $l_2=1$ м, $a=0.2$ м, $b=0.8$ м, $m=0.4$, $v_1=0.1$ м/доба, $v_2=0.001$ м/доба, $D_1=0.00002$ м²/доба, $D_2=0.0001$ м²/доба, $\beta \in \{0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5\}$ і вимірюється в одиницях 1/доба, $\Gamma \in \{0.667, 0.5, 0.25\}$.

Аналіз результатів свідчить про зменшення концентрації вільного і сорбованого забруднювача в напрямку руху конвективного потоку і від середини області до її нижньої і верхньої меж. Найбільшого значення ці величини набувають на конвективному сліді. Нижче цієї зони (рис. 1) спостерігається сплеск концентрації за рахунок надходження в цю область забруднень в основному дифузійним шляхом. Максимум концентрації з часом зноситься конвективним потоком у напрямку осі x_1 . В результаті дифузійного надходження

забруднювача з точок, що лежать далі вздовж прямої x_1 , відбувається збільшення максимальної величини концентрації забруднювача.

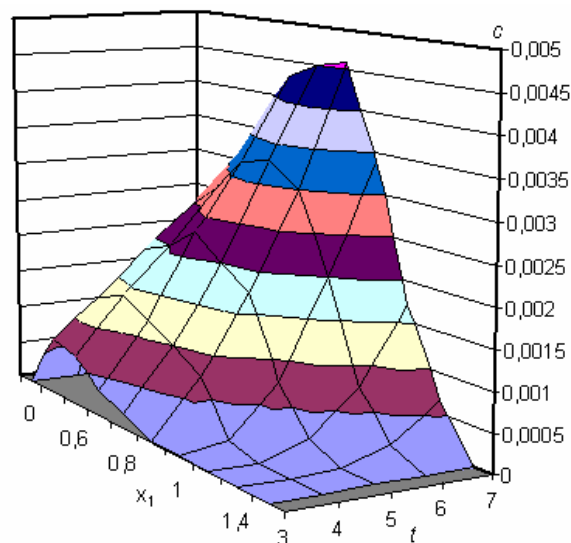


Рис. 1. Зміна в часі концентрації вільного забруднювача в напрямку конвективного переносу x_1 при $x_2 = 0.1$.

Досліджувався вплив коефіцієнта Генрі на величину сорбованого і вільного забруднювача в прямокутній області $\{0.2 \leq x_1 \leq 0.5, 0.2 \leq x_2 \leq 0.8\}$, розташованій поблизу зони викиду. На рис. 2–3 наводяться залежності усереднених по області значень концентрацій c і N від часу для різних значень коефіцієнта Γ .

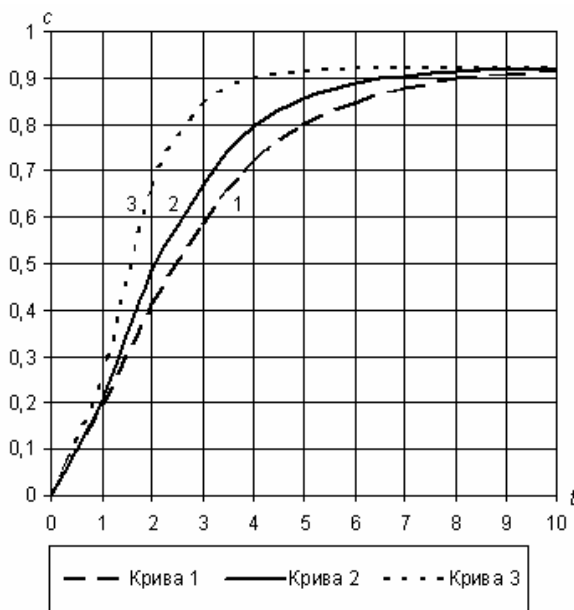


Рис. 2. Залежність концентрації вільного забруднювача (криві 1–3) від коефіцієнта Генрі (крива 1 – $\Gamma = 0.667$, крива 2 – $\Gamma = 0.5$, крива 3 – $\Gamma = 0.25$).

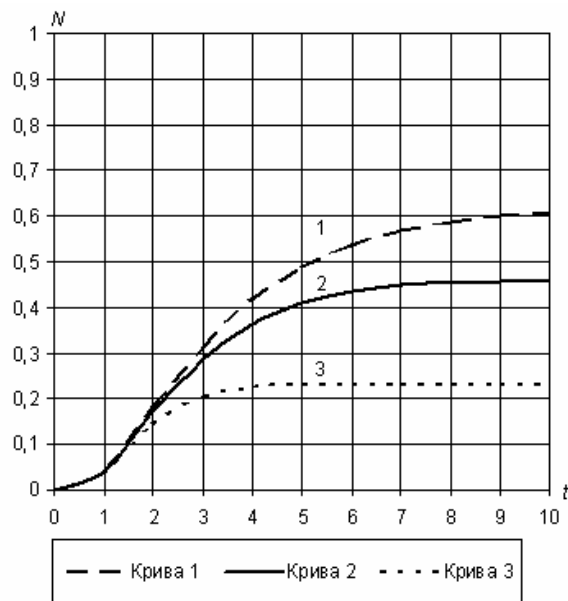


Рис. 3. Залежність концентрації сорбованого забруднювача (криві 1–3) від коефіцієнта Генрі (крива 1 – $\Gamma = 0.667$, крива 2 – $\Gamma = 0.5$, крива 3 – $\Gamma = 0.25$).

З отриманих результатів видно, що зменшення коефіцієнта Генрі від 0.667 до 0.25 приводить до монотонного зростання концентрації вільного забруднювача, в той же час значення концентрації сорбованого забруднювача зменшуються.

Список використаних джерел

1. Shestakov V.M. The dynamics of groundwater / V.M. Shestakov. – Moscow : Moscow State Univ., 1979. – 368 p. (in Russian).
2. Simulation of water-salt regime of soils using a computer / ed. V.A. Kovda. – Moscow : Nauka, 1976. – 123 p. (in Russian).
3. Polubarinova-Kochina P.Ya. The theory of groundwater flow / P.Ya. Polubarinova-Kochina. – Moscow: Nauka, 1977. – 664 p. (in Russian).
4. Samarskiy A.A. The theory of difference schemes / A.A. Samarskiy. – Moscow: Nauka, 1983. – 616 p. (in Russian).
5. Ortega J. Iterative solution of nonlinear equations in several variables / J. Ortega, W. Rheinboldt. – M. : Mir, 1975. – 558 p. (in Russian).
6. Golubev V.S. The dynamics of geochemical processes / V.S. Golubev. – Moscow : Nedra, 1981. – 208 p. (in Russian).

5. Висновок

Результати розрахунків показують, що процеси сорбції суттєво впливають на величину концентрації забруднень в ґрунтових потоках і повинні враховуватись при математичному моделюванні міграції забруднюючих речовин

Розроблене програмне забезпечення дозволяє проводити розрахунки і у випадку коли розподіл речовини між фазами відбувається згідно ізотермі Ленгмюра, внаслідок чого процеси сорбції забруднювача можуть характеризуватися нелінійним рівнянням.

У подальших дослідженнях важливими можуть бути задачі визначення невідомих параметрів сорбції та джерел забруднення ґрунтових вод [9]. Подібні задачі виникають у системі моніторингу великих промислових об'єктів, коли ведуться спостереження за станом забрудненості води, що лише констатують факт проникнення забруднень у ґрунтові води і, як правило, не дають можливості з'ясувати, де саме розташоване джерело та яка його потужність. Перспективним у вирішенні таких проблем є розв'язування обернених задач, в яких необхідно відтворювати деякі параметри процесу міграції забруднюючих речовин при наявності інформації про розв'язок задачі.

7. Titushkina Z.Yu. Simulation of movement of pollutants in groundwater and soil / Z.Yu. Titushkina // Mathematical modeling. Applied problems in mathematical physics. – Riga : Latv. Univ., 1990. – P. 172–181. (in Russian).
8. Vakal E.S. Simulation of the movement of pollutants including sorption process / E.S. Vakal, V.V. Lychman // Intellectual information-analytical systems and complexes. – Kyiv, 2000. – P. 42–46. (in Russian).
9. Vakal E.S. Numerical calculation of sources parameters in mass transfer problems with the sorption process / E.S. Vakal, V.V. Popov, O.B. Stelya, O.S. Trygub // International V.Ya.Skorobohatko mathematical conference, September 27 – October 1, 2004, Drohobych : abstracts. – Lviv, 2004. – P. 36. (in Ukrainian).

Надійшла до редколегії 26.09.13

УДК 532.5

Голіченко О.Л., аспірант

Рух рідини всередині циліндра при переключенні швидкості на границі.

В статті розглянуте перемішування в'язкої, однорідної, нестисливої рідини при малих числах Рейнольдса в скінченному круговому циліндрі. Задача розглядається в рамках моделі Стокса. Перемішування відбувається за рахунок періодичного переключення швидкостей на верхній і нижній границях циліндра. Наведена оцінка впливу нестационарності рівнянь руху при переключенні швидкостей на границі. Розглянутий вплив періоду переключення на якість перемішування.

Ключові слова: Скінченний циліндр, наближення Стокса, перемішування рідини.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4е, e-mail: Golichenko_O_L@mail.ru

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

Постановка задачі

В статті розглядається перемішування нестислої, в'язкої, однорідної рідини всередині скінченного кругового циліндра при малих числах Рейнольдса (Рис. 1а). В циліндричних координатах циліндр з рідиною займає область $r \in [0,1]$, $z \in [-h, h]$, $\theta \in [0, 2\pi)$. Бічна поверхня циліндра $r=1$ нерухома, в той час як верхня і нижня стінки $z = \pm h$ рухаються в постійною швидкістю, що змінюється через кожний проміжок часу T . Для опису руху рідини використовується наближення Стокса.

$$\mu \nabla^2 \vec{u} = \nabla p, \quad \nabla \vec{u} = 0 \quad (1)$$

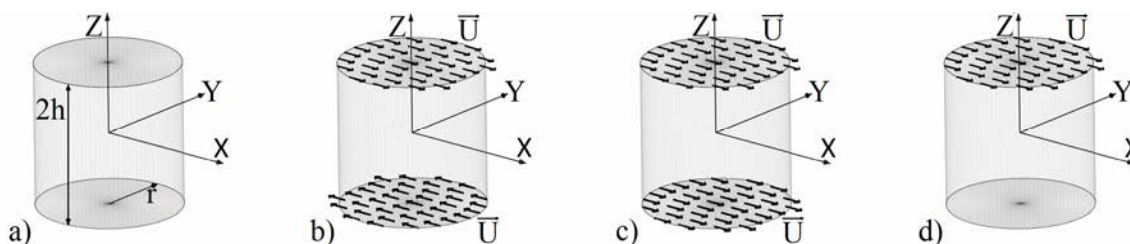


Рис. 1. Геометрія циліндричної області а), та граничні умови, що розглядаються б) - д).

Oleksandr L. Golichenko, PhD student

Fluid flow inside the cylinder with switching velocity at the boundary

Mixing of viscous, homogeneous, incompressible fluid at low Reynolds numbers inside the finite circular cylinder is considered. Stokes approximation is used to present the fluid flow field. The mixing is due to periodic switching speeds at the upper and lower boundaries of the cylinder. The evaluation of the impact of equation non-stationarity at switching velocity on the border is given. The influence of a switch time period on the quality mixing is studied.

Key words: Finite cylinder, Stokes approximation, mixing of fluid

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4e, e-mail: Golichenko_O_L@mail.ru

де $\vec{u}$ – векторне поле швидкості, p – скалярне поле тиску, μ – динамічна в'язкість. Граничні умови мають вигляд:

$$\begin{cases} u_r(\theta, z) = 0 \\ u_\theta(\theta, z) = 0 \\ u_z(\theta, z) = 0 \end{cases} \quad r = 1 \quad \begin{cases} u_r(r, \theta) = U_{\mp}^{\pm} \cos(\theta) \\ u_\theta(r, \theta) = U_{\mp}^{\pm} \sin(\theta) \\ u_z(r, \theta) = 0 \end{cases} \quad z = \pm h \quad (2)$$

де $U_{\mp}$ - деяка константа. Надалі буде зустрічатися 3 види граничних умов. Для першого (рис.1б) $U_{\mp} = \pm 1$ при $z = \pm h$. Для другого (рис.1с) $U_{\mp} = 1$ при $z = \pm h$. Для третього (рис.1д) $U_{\mp} = 1$ при $z = h$ і $U_{\mp} = 0$ при $z = -h$.

Вплив процесу переключення швидкостей на границі на рух рідини всередині циліндра.

В момент переключення швидкостей на границі циліндра рідина всередині циліндра переходить від одного стаціонарного руху (що відповідає граничним умовам до переключення) до іншого (що відповідає граничним умовам після переключення). Під час цього переходу рух рідини не є стаціонарним і потребує додаткового аналізу. Розглянемо рівняння Нав'є-Стокса, що описує всі рухи однорідної, нестисливої, вязкої рідини:

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = \nu \Delta \vec{V} - \frac{1}{\rho} \nabla p \quad (3)$$

де $\vec{V} = (V_x, V_y, V_z)$ - швидкість рідини, ν - кінематична вязкість, ρ - густина рідини і p - тиск рідини. В безрозмірних координатах $t^{\text{бп}} = \frac{U_{\text{сп}}}{r} t$, $\vec{V}^{\text{бп}} = \frac{\vec{V}}{U_{\text{сп}}}$, $p^{\text{бп}} = \frac{r}{\mu \cdot U_{\text{сп}}} p$, де $U_{\text{сп}}$ - характерна швидкість рідини на границі (2), r - радіус циліндра, рівняння (3) приймає вигляд:

$$\text{Re} \frac{\partial \vec{V}^{\text{бп}}}{\partial t^{\text{бп}}} + \text{Re} (\vec{V}^{\text{бп}} \cdot \nabla) \vec{V}^{\text{бп}} = \Delta \vec{V}^{\text{бп}} - \nabla p^{\text{бп}} \quad (4)$$

де $\text{Re} = \frac{r \cdot U_{\text{сп}}}{\nu}$ - число Рейнольдса. Ми розглядаємо рух рідини при малих числах Рейнольдса $\text{Re} \ll 1$, тому доданком $\text{Re} (\vec{V}^{\text{бп}} \cdot \nabla) \vec{V}^{\text{бп}}$ можна знехтувати. Оскільки миттєва зміна швидкості на границі циліндра спричиняє великі значення похідної швидкості по часу всередині циліндра $|\partial V^{\text{бп}} / \partial t^{\text{бп}}| \gg 1$, то одразу ж знехтувати доданком $\text{Re} (\partial V^{\text{бп}} / \partial t^{\text{бп}})$ і отримати наближення Стокса (1) не можна. Розглянемо рівняння:

$$\text{Re} \frac{\partial \vec{V}^{\text{бп}}}{\partial t^{\text{бп}}} - \Delta \vec{V}^{\text{бп}} = -\nabla p^{\text{бп}} \quad (5)$$

і оціними швидкість рідини і відстань яку пройдуть частинки рідини при переході від одного стаціонарного руху до іншого.

Розглянемо рух рідини під дією рівняння (5) в прямокутній області Ω (рис.2) з нульовими граничними умовами $\vec{V}^{\text{бп}}(x, y, z, t)|_{\partial\Omega} = 0$, і деякою швидкістю $\vec{V}_0^{\text{бп}}(x, y, z)$ в початковий момент часу $\vec{V}^{\text{бп}}(x, y, z, 0) = \vec{V}_0^{\text{бп}}(x, y, z)$.

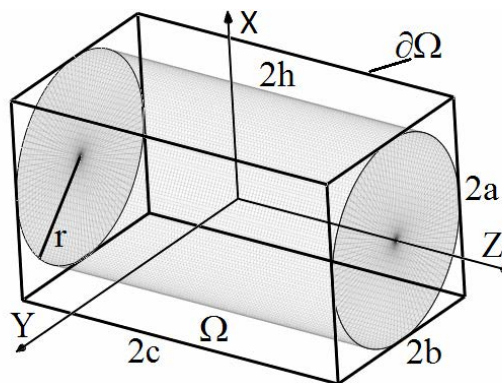


Рис. 2. Прямокутна область і вписаний в неї циліндр.

За допомогою методу розділення змінних [1] знаходимо швидкість рідини в усі наступні моменти часу.

$$\vec{V}_{np}^{\text{бп}}(x, y, z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sin\left(\frac{\pi \cdot n}{2a} \left(x + \frac{\pi}{2}\right)\right) \sin\left(\frac{\pi \cdot k}{2b} \left(y + \frac{\pi}{2}\right)\right) \sin\left(\frac{\pi \cdot l}{2c} \left(z + \frac{\pi}{2}\right)\right) \times \left[V_{0,n,k,l} e^{-\frac{1}{\text{Re}} \left(\left(\frac{\pi \cdot n}{2a}\right)^2 + \left(\frac{\pi \cdot k}{2b}\right)^2 + \left(\frac{\pi \cdot l}{2c}\right)^2 \right) t} + \int_0^t e^{-\frac{1}{\text{Re}} \left(\left(\frac{\pi \cdot n}{2a}\right)^2 + \left(\frac{\pi \cdot k}{2b}\right)^2 + \left(\frac{\pi \cdot l}{2c}\right)^2 \right) (t-\tau)} \nabla p_{n,k,l} d\tau \right]$$

Фізичний зміст доданку зі знаком інтегралу є вплив внутрішніх джерел тиску всередині розглядуваної області на швидкість рідини. Оскільки всередині розглядуваної області немає внутрішніх джерел тиску, то і доданок з інтегралом дорівнює нулю:

$$\vec{V}_{np}^{\text{бп}}(x, y, z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} V_{0,n,k,l} e^{-\frac{1}{\text{Re}} \left(\left(\frac{\pi \cdot n}{2a}\right)^2 + \left(\frac{\pi \cdot k}{2b}\right)^2 + \left(\frac{\pi \cdot l}{2c}\right)^2 \right) t} \times \sin\left(\frac{\pi \cdot n}{2a} \left(x + \frac{\pi}{2}\right)\right) \sin\left(\frac{\pi \cdot k}{2b} \left(y + \frac{\pi}{2}\right)\right) \sin\left(\frac{\pi \cdot l}{2c} \left(z + \frac{\pi}{2}\right)\right) \quad (6)$$

З принципу максимуму [1] для рівнянь параболічного типу випливає, що $|\vec{V}_{np}^{\text{бп}}(x, y, z, t)| \leq |\vec{V}_0^{\text{бп}}(x, y, z)|$. Таким чином з формули (6) бачимо, що швидкість експоненційно прямує до нуля. Крім того видно, що величина швидкості переважно визначається першими членами ряду (6). Тому щоб оцінити

порядок швидкості достатньо оцінити перший член ряду:

$$\left| V_{0,1,1} \cdot e^{-\frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} \right) \frac{\pi^2 t}{4}} \sin \left(\frac{\pi}{a} \left(x + \frac{\pi}{2} \right) \right) \sin \left(\frac{\pi}{b} \left(y + \frac{\pi}{2} \right) \right) \sin \left(\frac{\pi}{c} \left(z + \frac{\pi}{2} \right) \right) \right| \leq \quad (7)$$

$$\leq |V_{0,1,1}| \cdot e^{-\frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} \right) \frac{\pi^2 t}{4}}$$

За весь час частинка під дією швидкості (7) пройде шлях:

$$S = \int_0^{\infty} |V_{0,1,1}| \cdot e^{-\frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} \right) \frac{\pi^2 t}{4}} dt = |V_{0,1,1}| \frac{4 \text{Re}}{\left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} \right) \cdot \pi^2} \quad (8)$$

З формули (6) також видно, що чим менший розмір має розглядувана область, тим швидше швидкість рідини всередині області прямує до нуля. Тому верхні оцінки швидкості отримані для прямокутної області будуть справедливими і для циліндричної області вписаної в прямокутну область, для якої ці оцінки були отримані (Рис.2). Отже всі одержані для прямокутної області оцінки будуть справедливими і для циліндричної області з радіусом r і висотою $2h$, якщо покласти $a = b = r$, $c = h$.

Враховуючи лінійність рівняння (5), після переключення швидкостей на границі циліндра (в момент часу $t = 0$), швидкість рідини всередині циліндра дорівнюватиме $\vec{V}^{\text{dp}}(x, y, z, t) = \vec{V}_{n,n}^{\text{dp}}(x, y, z) + \vec{V}_{\text{nep}}^{\text{dp}}(x, y, z, t)$, де $\vec{V}_{n,n}^{\text{dp}}(x, y, z)$ - стаціонарний рух рідини, що відповідає граничним умовам після переключення. $\vec{V}_{\text{nep}}^{\text{dp}}(x, y, z, t)$ - рух рідини всередині циліндра з нульовими граничними умовами і початковою швидкістю $\vec{V}_0^{\text{dp}}(x, y, z) = \vec{V}_{\text{dp}}^{\text{dp}}(x, y, z) - \vec{V}_{n,n}^{\text{dp}}(x, y, z)$, де $\vec{V}_{\text{dp}}^{\text{dp}}(x, y, z)$ - стаціонарний рух рідини, що відповідає

граничним умовам до переключення. Вплив переходу від одного стаціонарного руху до іншого і описується швидкістю $\vec{V}_{\text{nep}}^{\text{dp}}(x, y, z, t)$, для якої справедливі одержані раніше оцінки (6) (7) і (8). Таким чином для циліндру з $r = 1$, $h = 1$, швидкостями на границі до переключення $U_{\text{dp},n} = 1$, після переключення $U_{\text{dp},n,n} = -1$, заповненого вязкою рідиною з $\text{Re} = 10^{-3}$ будемо мати, що в момент часу $t = 2 \cdot 10^{-3}$ після переключення $\vec{V}_{\text{nep}}^{\text{dp}}(x, y, z, t)$ має порядок 10^{-7} і продовжує зменшуватися за експонентою, а загальна відстань яку пройде частинка рідини під дією $\vec{V}_{\text{nep}}^{\text{dp}}(x, y, z, t)$ має порядок $10^{-4} - 10^{-3}$. Отже одержані оцінки дозволяють нехтувати впливом на рух рідини всередині циліндра процесу переходу від стаціонарного руху, що відповідає граничним умовам до переключення, до стаціонарного руху, що відповідає граничним умовам після переключення, і вважати, що такий перехід відбувається миттєво і швидкості всередині циліндра змінюються миттєво.

Принцип дії механізму перемішування за допомогою переключення швидкостей на границі

Надалі будемо розглядати рух рідини лише в площині $y = 0$ (рис.1) всередині циліндра. Для розглядуваних граничних умов, одержанні для площини $y = 0$ результати можна розповсюдити на весь циліндр (як в роботі [2]). Поле швидкостей рідини всередині циліндра детально досліджувалось в роботі [2]. Для граничних умов (Рис.1b), (Рис.1c) і (Рис.1d) воно зображене на (рис.3).

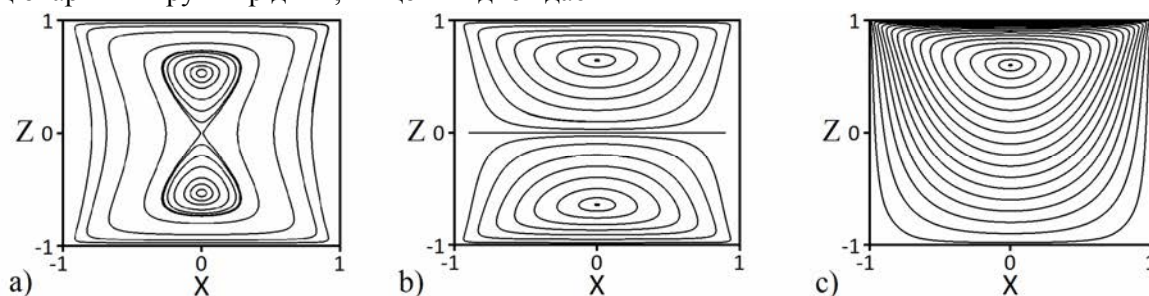


Рис. 3. Лінії току всередині циліндра в площині $y = 0$ для граничних умов з (рис.1). а) для граничних умов (рис.1b); б) для граничних умов (рис.1c); в) для граничних умов (рис.1d).

Стационарні лінії току повністю визначають траєкторії частинок рідини. Тому пляма рідини не може вийти за межі області границя якої утворена лініями току, що дотикаються до плями (рис. 4).

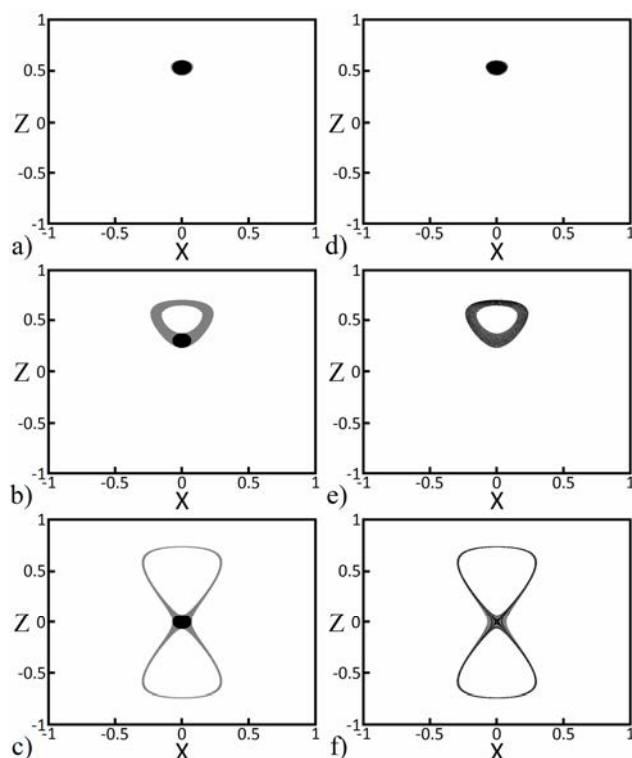


Рис. 4. Рух різних плям рідини всередині циліндра, в площині $y=0$, для граничних умов з рис.1b. Чорний колір – пляма, що рухається. Сірий колір – область обмежена лініями току, що дотикаються до плями. В початковий момент пляма є колом з радіусом $r=0.07$. а) $t=0$, центр плями $x=0$, $z=0.533$; б) $t=0$, центр плями $x=0$, $z=0.3$; в) $t=0$, центр плями $x=0$, $z=0$; д) (рис. 4a) при $t=72$; е) (рис. 4b) при $t=72$; ф) (рис. 4c) при $t=72$

Вивести рідину за лінію току можна лише «розірвавши» її, тобто змінивши поле швидкостей всередині циліндра. Для цього будемо почергово «переключати» швидкість на границі через фіксований проміжок часу T . Швидкість на границі буде переключатися між граничними умовами (рис.1b) та (рис.1c). Для $T=5$ зміна області обмеженої дотичними лініями току, при кожному переключенні зображено на (рис. 5).

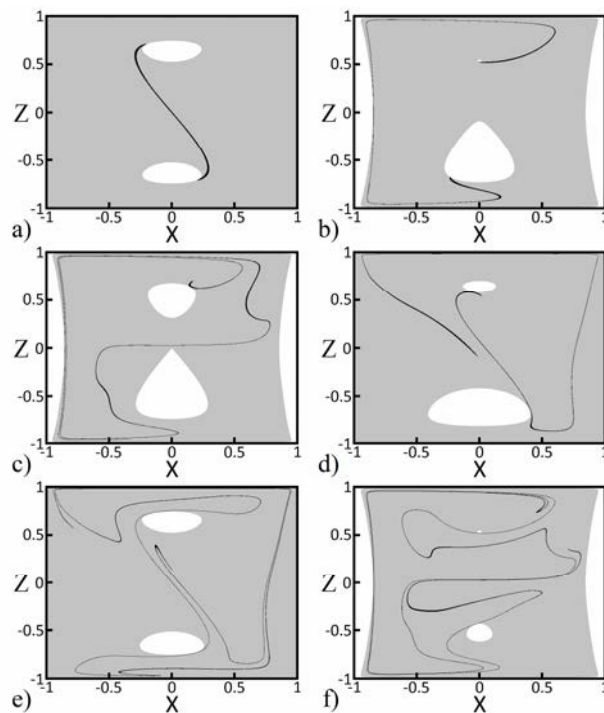


Рис.5. Положення плями рідини (чорний колір) і області утвореної дотичними до плями лініями току (сірий колір) в площині $y=0$ в моменти переключення швидкості на границі для плями, що в початковий момент $t=0$ зображена на (рис.4c). а) $t=5$; б) $t=10$; в) $t=15$; д) $t=20$; е) $t=25$; ф) $t=30$

Таким чином бачимо, що переключення швидкості на границі дозволяє, за рахунок періодичної зміни ліній току, розмазати пляму рідини в тих областях циліндра, куди б вона не змогла потрапити без переключення.

Вплив періоду переключення на перемішування рідини

Розглянемо, як впливає період переключення швидкості на границі T на перемішування рідини всередині циліндра, при переключенні між граничними умовами (рис. 1b) та (рис. 1c). В стаціонарному полі рух частинки повністю визначається лінією току. Оскільки, для довільного періоду T , невідомо на яку нову лінію току потрапить точка під час зміни поля швидкості, замість лінії току, дослідимо перерізи Пуанкаре цієї точки (координати точки в моменти закінчення переключення швидкостей на границі). Для різних періодів переключення T , для точки $(0,0)$ матимемо картину зображену на (рис.6).

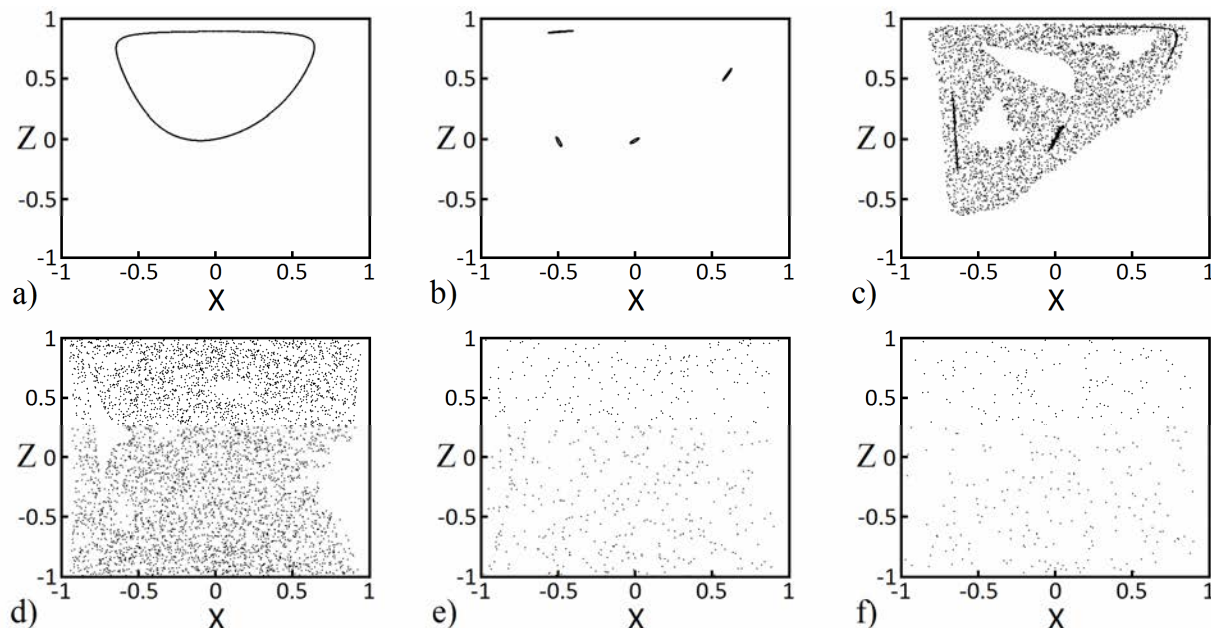


Рис.6. Перерізи Пуанкаре, в площині $y=0$, для точки, що в початковий момент часу $t=0$ знаходиться в центрі циліндра $x=0$, $z=0$ для різних періодів переключення T . а) $T=0.5$; б) $T=1.5$; в) $T=2.3$; д) $T=6$; е) $T=10$; ф) $T=15$; Для кожного малюнку точка пошла 5000 періодів T .

Оскільки для різних точок циліндра, при одному і тому ж періоді переключення T , перерізи Пуанкаре можуть принципово відрізнятися, то побудуємо ці перерізи не лише для однієї точки, а для цілого набору точок (рис. 7)

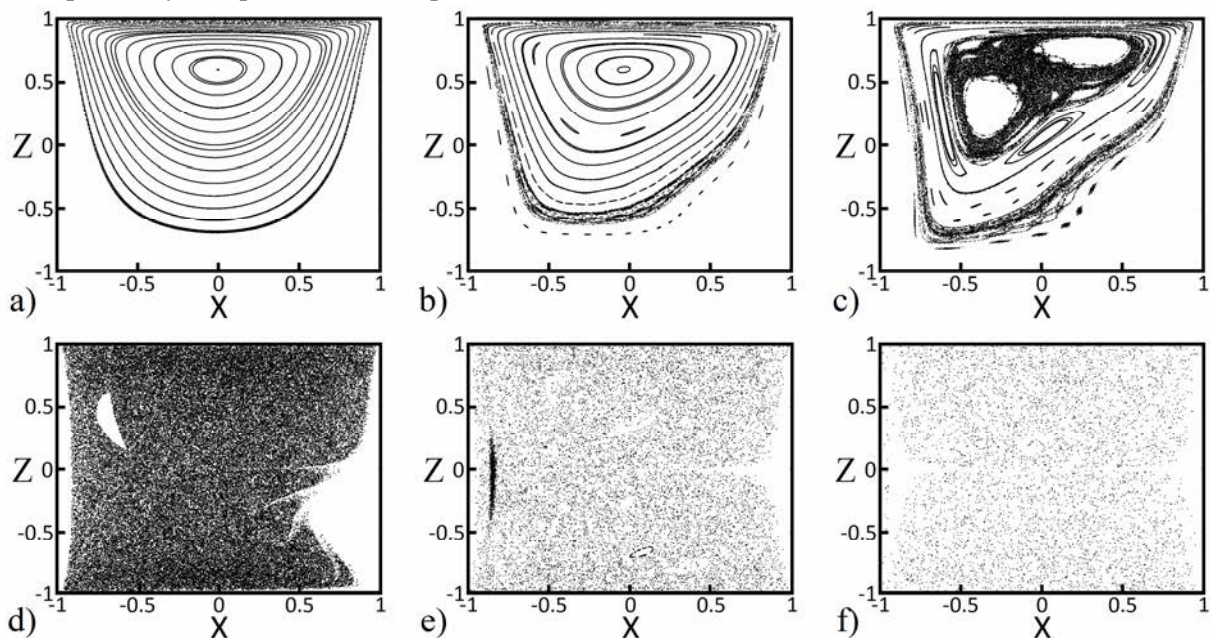


Рис.7. Перерізи Пуанкаре, в площині $y=0$, для набору точок, що в початковий момент часу $t=0$ знаходиться на лінії циліндра $x=0$, для різних періодів переключення T . а) $T=0.1$; б) $T=1$; в) $T=2$; д) $T=5$; е) $T=10$; ф) $T=20$; Для кожного малюнку точки пошли 5000 періодів T .

Бачимо, що для малих періодів переключення (рис. 7а) перерізи Пуанкаре точок співпадають з лініями току (рис. 3с) для граничних умов (рис. 1д). Граничні умови (рис. 1д) є сумою граничних умов (рис. 1б) і (рис. 1с). Як наслідок рух рідини всередині циліндра при граничних умовах (рис.

1d) для малих T подібний до суми рухів всередині циліндра при граничних умовах (рис. 1b) і (рис. 1c). Тут проявляється лінійність вихідних рівнянь (1). Як результат дуже малі періоди переключення швидкості на границі створюють всередині циліндра рух подібний до стаціонарного, що не сприяє ефективному перемішуванню плями по усьому циліндрі. При подальшому збільшенні періоду T (рис. 7b) і (рис. 7c) перерізи Пуанкаре у вигляді ліній починають деформуватися і руйнуватися. З'являються області, в яких в моменти переключення швидкостей точка займає не якусь лінію, а цілу область. При деякому значен-

ні періоду T перерізи Пуанкаре у вигляді ліній руйнуються і точки займають увесь циліндр (рис. 7d). Така картина перерізів Пуанкаре свідчить про найефективніше перемішування рідини всередині циліндра. При подальшому збільшенні T густина точок в перерізі Пуанкаре падає (рис. 7e) і (рис. 7f), що свідчить про те, що перемішування відбувається по всьому циліндрі але його ефективність за часом падає. Підтвердженням одержаних результатів є положення однієї і тієї ж плями в один і той же момент часу при різних значеннях T (рис. 8).

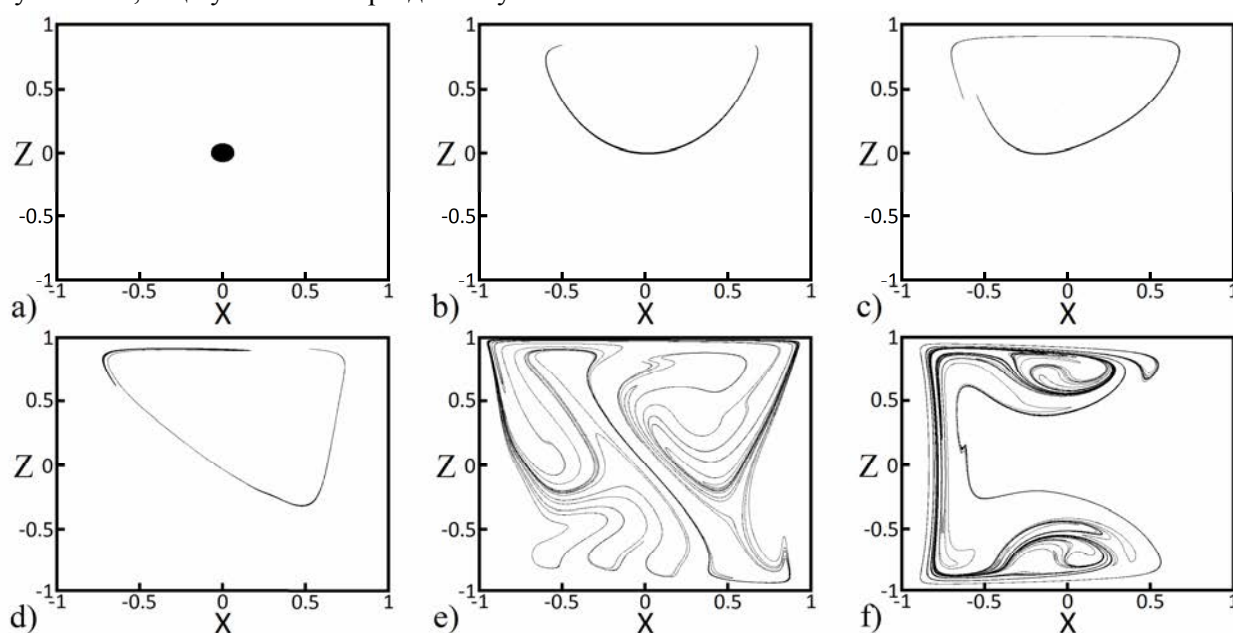


Рис. 8. Положення круглої плями а) в момент часу $t = 54$ для різних періодів переключення швидкості на границі T , в площині $y = 0$. б) $T = 0.1$; в) $T = 1$; г) $T = 2$; д) $T = 5$; е) $T = 10$.

Висновки

Одержані в роботі результати показують, що переключення швидкості на границях циліндру є ефективним механізмом перемішування рідини всередині циліндра, дозволяючи рідині змінювати стаціонарні лінії току. Показано, що при малих числах Рейнольдса зміну швидкості всередині циліндра можна вважати миттєвою.

Доведено, що вибір періоду переключення швидкостей на границі суттєво впливає на процес перемішування рідини. При занадто малих періодах зміни швидкості, перемішування не є ефективним. При занадто великих періодах зміни швидкості, ефективне перемішування рідини потребує більше часу, ніж при оптимальних періодах.

Список використаних джерел

1. Tihonov A.N. The equation of mathematical physics/ A.N. Tihonov, A.A. Samarskiy – Moscow: Nauka, 1977 – 735
2. Golichenko O.L. Fluid flows in the finite circular cylinder/ O.L. Golichenko, V.S. Mal'yuha // Bulletin of Taras Shevchenko Na-

tional University of Kyiv. Series Physics & Mathematics. Kyiv – 2013 – 2 – pp 61-64 (in Ukrainian)

Надійшла до редколегії 26.09.2013

УДК 517.9

Константинов О. Ю.¹ к.ф.-м.н., доц.,
Гриник Ю. М.²

Істотний спектр однієї нееліптичної граничної задачі

Вивчається істотний спектр одного матричного диференціального оператора.

Ключові слова: істотний спектр, матричний диференціальний оператор

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4е, e-mail: konstant12@yahoo.com

² Київський національний університет технологій та дизайну, 01011, м. Київ, вул. Неміровича-Данченка 2, e-mail: yura.grinyk@gmail.com

Статтю представив академік НАНУ, д. ф.-м. н., проф. Перестюк М.О.

1 Вступ

Робота продовжує і узагальнює дослідження [9, 10, 5, 2, 3] присвячені вивченню істотно-го спектру класу матричних диференціальних операторів змішаного порядку, пов'язаного з однією моделлю магнітогідродинаміки.

Нехай Ω обмежена ліпшицева область в $\mathbb{R}^N$, додатні функції a, ρ задовольняють умову Ліпшиця на $\bar{\Omega}$. Розглянемо в ваговому гільбертовому просторі $\mathcal{H}_N := (L_2(\Omega, \rho(x)dx))^N$ диференціальний оператор

$$Af = -\rho^{-1} \nabla \rho a \operatorname{div} f$$

з областю визначення

$$D(A) := \{ f \in \mathcal{H}_N \mid \operatorname{div} f \in H^1(\Omega), \nu \cdot f|_{\partial\Omega} = 0 \}.$$

Тут $H^1(\Omega)$ – соболівський простір, $\operatorname{div} f$ розуміється в сенсі узагальнених функцій, ν – вектор зовнішньої нормалі до границі області Ω . Зауважимо, що A невід'ємний самоспряжений оператор в $\mathcal{H}_N$. Позначимо через B оператор множення в $\mathcal{H}_N$ на діагональну матрицю з неперервними на $\bar{\Omega}$ комплекснозначними функціями $b_1, b_2, \dots, b_N$ на діагоналі. Нехай $c_1, c_2 : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{C}$ – ліпшицеві функції на $\bar{\Omega}$, $d : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{C}$ неперервна на $\bar{\Omega}$. У просторі $\mathcal{H} := \mathcal{H}_N \times \mathcal{H}_1 = (L_2(\Omega, \rho(x)dx))^{N+1}$ розглянемо матричний диференціальний оператор

$$L^0 = \begin{pmatrix} A + B & -i\rho^{-1} \nabla \rho c_1 \\ -ic_2 \operatorname{div} & d \end{pmatrix}$$

O. Yu. Konstantinov¹, Ph. D., associate professor,
Yu. M. Grinyk²

The essential spectrum of one non-elliptic boundary value problem

We study the essential spectrum of one matrix differential operator.

Key words: essential spectrum, matrix differential operator

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4e, e-mail: konstant12@yahoo.com

² Kyiv National University of Technologies and Design, 01011, Kyiv, Nemirovich-Danchenko st., 2, e-mail: yura.grinyk@gmail.com

з областю визначення $D(L^0) := D(A) \times H^1(\Omega)$. Оператор L^0 має замикання (див. [9]), яке позначатимемо через L . Через $\sigma(T)$ ($\sigma_{\text{ess}}(T)$) будемо позначати спектр (істотний спектр) оператора T . Позначимо

$$\mathcal{T} := \bigcup_{x \in \bar{\Omega}} \operatorname{conv}(\{b_1(x), b_2(x), \dots, b_N(x)\}), \quad (1)$$

де $\operatorname{conv}(F)$ опукла оболонка множини F . Основним результатом роботи є наступна теорема.

Теорема 1.

$$\sigma_{\text{ess}}(L) = \mathcal{T} \cup \left(d - \frac{c_1 c_2}{a} \right) (\bar{\Omega}). \quad (2)$$

Зауважимо, що у випадку $N = 2$ твердження Теорема 1 було отримано в [2], випадок загального N і дійсної діагональної матриці B розглянуто в [3]. В [5] для $N = 2$ висліджувався оператор L з недіагональною матрицею B .

2 Доведення теореми 1

Нехай P – ортопроектор на підпростір

$$\mathcal{L} := \operatorname{Ker} A = \{ f \in \mathcal{H}_N \mid \operatorname{div} f = 0, \nu \cdot f|_{\partial\Omega} = 0 \}$$

простору $\mathcal{H}_N$, а U — звуження оператора PBP на $\mathcal{L}$. З результатів [9, 2, 5] випливає, що

$$\sigma_{\text{ess}}(L) = \sigma_{\text{ess}}(U) \cup \left(d - \frac{c_1 c_2}{a}\right)(\bar{\Omega}). \quad (3)$$

Згідно з (2), (3) досить довести, що $\sigma_{\text{ess}}(U) = \mathcal{T}$. Зафіксуємо $x \in \bar{\Omega}$ і розглянемо сталу матрицю $B_x := B(x)$ та відповідний оператор $U_x := PB_x P$ в просторі $\mathcal{L}$. Зауважимо, що далі суттєво використовується компактність комутатора $[P, \alpha] = P\alpha - \alpha P$, де α оператор множення на довільну функцію $\alpha \in C(\bar{\Omega})$ (див. [9, 2]).

Спочатку розглянемо випадок сталої діагональної матриці B і покажемо, що

$$\sigma(U) = \sigma_{\text{ess}}(U) = \text{conv}(\{b_1, b_2, \dots, b_N\}). \quad (4)$$

Нагадаємо [4], що для обмеженого в гільбертовому просторі H оператора T виконується $\sigma(T) \subset \overline{W(T)}$, де

$$W(T) := \{ (Tf, f) \mid f \in H, \|f\| = 1 \}$$

— числовий образ оператора T . Очевидно, що

$$\begin{aligned} W(U) &= \{ (Uf, f) \mid f \in \mathcal{L}, \|f\| = 1 \} = \\ &= \{ (Bf, f) \mid f \in \mathcal{L}, \|f\| = 1 \} \subset W(B) = \\ &= \text{conv}(\{b_1, b_2, \dots, b_N\}). \end{aligned}$$

Звідси випливає, що

$$\sigma(U) \subset \text{conv}(\{b_1, b_2, \dots, b_N\}). \quad (5)$$

Доведемо обернене включення. Припустимо спочатку, що область $\Omega \in N$ - вимірним кубом з ребром рівним τ і $\rho \equiv 1$

$$\Omega = [A_1, B_1] \times [A_2, B_2] \times \dots \times [A_N, B_N] \quad (6)$$

($B_i = A_i + \tau$, $i = 1, \dots, N$). Нехай λ власне число оператора U і f відповідна власна вектор-функція. Тоді $f \in \mathcal{L}$ та $(B - \lambda)f \in \mathcal{L}^\perp$. Використовуючи означення $\mathcal{L}$ та явний опис його ортогонального доповнення [6]

$$\mathcal{L}^\perp = \{\nabla g \mid g \in H^1(\Omega)\},$$

отримаємо систему диференціальних рівнянь для знаходження власних чисел і власних функцій оператора U

$$\begin{cases} \partial_1 f_1 + \partial_2 f_2 + \dots + \partial_N f_N = 0 \\ (\nu_1 f_1 + \nu_2 f_2 + \dots + \nu_N f_N)|_{\partial\Omega} = 0 \\ (b_1 - \lambda)f_1 = \partial_1 h \\ (b_2 - \lambda)f_2 = \partial_2 h \\ \dots \\ (b_N - \lambda)f_N = \partial_N h. \end{cases}$$

Звідси маємо, що

$$f_i = \frac{\partial_i h}{b_i - \lambda}, \quad 1 \leq i \leq N, \quad (7)$$

та

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N (b_i - \lambda)^{-1} \partial_i^2 h = 0, \\ \sum_{i=1}^N (b_i - \lambda)^{-1} \nu_i \partial_i h|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Будемо шукати розв'язок (8) у вигляді

$$h_n(x) = \frac{1}{n} \prod_{i=1}^N \cos \frac{\pi k_i n (x_i - A_i)}{\tau}. \quad (9)$$

Тут $n \geq 1$, $k_1, k_2, \dots, k_N$ — деякі натуральні числа. Безпосередньо перевіряється, що h_n задовольняє (9) якщо

$$\frac{k_1^2}{b_1 - \lambda} + \frac{k_2^2}{b_2 - \lambda} + \dots + \frac{k_N^2}{b_N - \lambda} = 0. \quad (10)$$

Позначимо через W множину тих λ , що для деяких натуральних $k_1, k_2, \dots, k_N$ виконано (10). Неважко показати, що W щільна в $\text{conv}(\{b_1, b_2, \dots, b_N\})$. Для $\lambda \in W$ послідовність функцій $\{f^{(n)}\}_{n \geq 1}$, побудована з послідовності (9) за допомогою формули (7) утворює ортогональну послідовність власних функцій оператора U . Звідси випливає твердження теореми в цьому частинному випадку.

Далі розглядаємо довільну ліпшицеву область Ω . Для $\lambda \in W$ і $x_0 \in \Omega$ побудуємо сингулярну послідовність функцій $\{g_n\}_{n \geq 1} \subset \mathcal{L}$ (див. [8]) таку, що

i) $g_n \xrightarrow{w} 0$, $n \rightarrow \infty$;

ii') для довільної кулі $\omega_{x_0} \subset \Omega$, що містить точку x_0

$$\int_{\omega_{x_0}} |g^n|^2 dx \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty;$$

iii) $Ug_n - \lambda g_n \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$.

Для побудови такої послідовності $\{g_n\}_{n \geq 1}$ розглянемо деякий гіперкуб Q вигляду (6), що лежить всередині області Ω і містить точку x_0 як внутрішню. У просторі $(L_2(Q, \rho(x)dx))^N$ розглянемо відповідний підпростір $\mathcal{L}_Q$. Зафіксуємо $\lambda \in W$. Згідно формул (7) та (9), побудуємо у

гіперкубі Q для оператора U_Q ортогональну послідовність власних функцій $\{f^n\}_{n \geq 1} \subset \mathcal{L}_Q$ та відповідну їй послідовність $\{h^n\}_{n \geq 1} \subset H^1(Q)$. Для всіх $n \geq 1$ отримаємо

$$(B - \lambda)f^n = \nabla h^n.$$

Згідно [7, с. 22, Теорема 1.4] множина

$$\mathcal{D} := \{v \in C_0^\infty(Q) \mid \operatorname{div} f = 0\}$$

є щільною у просторі $\mathcal{L}_Q$. Побудуємо послідовність функцій $\{g^n\}_{n \geq 1} \subset \mathcal{D}$ таку, що

$$\|g^n - f^n\| \rightarrow 0, \text{ при } n \rightarrow \infty. \quad (11)$$

Тоді

$$(B - \lambda)g^n - \nabla h^n \rightarrow 0, \text{ при } n \rightarrow \infty$$

у просторі $(L_2(Q, dx))^N$.

Позначимо через u^n продовження функцій h^n на всю область Ω побудоване наступним чином. Кожен з множників виду $\cos \frac{\pi k_i n (x_i - A_i)}{\tau}$ дорівнює або 1 або -1 на кінцях відрізка $[A_i, B_i]$. Зліва від точки A_i та справа від точки B_i продовжимо ці множники за тією ж формулою до першого перетину з віссю Ox_i , а далі покладемо їх рівними нулю. Ясно, що $\{u^n\}_{n \geq 1} \subset H^1(\Omega)$, та

$$\|\nabla u^n\|_{(L_2(\Omega \setminus Q, dx))^N} \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Звідси випливає, що

$$(B - \lambda)g^n - \nabla u^n \rightarrow 0, \text{ при } n \rightarrow \infty$$

в просторі $(L_2(\Omega, dx))^N$. Зокрема,

$$P(B - \lambda)g^n \rightarrow 0, \text{ при } n \rightarrow \infty.$$

Таким чином послідовність $\{g^n\}_{n \geq 1}$ сингулярна для оператора PBP в точці λ . Звідси легко випливає, що $\operatorname{conv}(\{b_1, b_2, \dots, b_N\}) \subset \sigma_{\text{ess}}(U)$. Враховуючи (5), маємо (4).

Зауважимо, що завдяки ii) завжди можна вважати, що виконується умова

ii) $\|g^n\| = 1, n \geq 1$.

Ясно, що наведена побудова сингулярної послідовності працює для довільного гіперкуба, що містить точку x_0 (як внутрішню). Зокрема (зменшуючи відповідні гіперкуби), можна побудувати нову послідовність $\{g^n\}_{n \geq 1} \subset C_0^\infty(\Omega)$, що буде задовольняти умови i), ii), iii), а також умови

iv) $\operatorname{div} g^n = 0$,

v) $\operatorname{supp} g^n \subset B(x_0, \frac{1}{n})$.

Ясно, що така послідовність буде сингулярною і у випадку загальної неперервної матриці B . Більш того це залишиться в силі і для загального неперервної функції ρ . Останнє твердження випливає з компактності оператора $(P - P^1)\alpha$ в $\mathcal{H}_N$. Тут $\alpha \in C_0^\infty(\Omega)$, P та P^1 — ортопроектори на $\mathcal{L}$ у просторах $\mathcal{H}_N = (L_2(\Omega, \rho(x)dx))^N$ та $(L_2(\Omega, dx))^N$ відповідно (ці простори мають еквівалентні норми, проте P відмінно від P^1 за рахунок різних скалярних добутоків).

Таким чином для довільного $x \in \Omega$ маємо

$$\sigma_{\text{ess}}(U_x) = \operatorname{conv}(\{b_1(x), b_2(x), \dots, b_N(x)\}) \subset \sigma_{\text{ess}}(U).$$

Звідси випливає, що

$$\mathcal{T} = \bigcup_{x \in \bar{\Omega}} \sigma_{\text{ess}}(U_x) \subset \sigma_{\text{ess}}(U),$$

що зводить обчислення спектру оператора U до випадку сталої матриці B .

Покажемо, що насправді справедливий наступний принцип локалізації

$$\bigcup_{x \in \bar{\Omega}} \sigma_{\text{ess}}(U_x) = \sigma_{\text{ess}}(U). \quad (12)$$

Для цього потрібно довести обернене включення

$$\sigma_{\text{ess}}(U) \subset \bigcup_{x \in \bar{\Omega}} \sigma_{\text{ess}}(U_x). \quad (13)$$

Припустимо, що $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(U)$, тоді існує послідовність $\{f^n\}_{n \geq 1} \subset \mathcal{L}$, така, що

- 1) $\inf_{n \geq 1} \|f^n\|_\rho > 0$;
- 2) $f^n \xrightarrow{w} 0, n \rightarrow \infty$;
- 3) $Uf^n - \lambda f^n \rightarrow 0, n \rightarrow \infty$, або $U^*f^n - \bar{\lambda}f^n \rightarrow 0, n \rightarrow \infty$.

Тобто $\{f^n\}$ сингулярна для U в точці λ , або $\{f^n\}$ сингулярна для U^* в точці $\bar{\lambda}$. Покажемо, що для $\{f^n\}$ існує точка $x_0 \in \bar{\Omega}$ така, що для довільної відкритої кулі $\omega_{x_0} \subset \mathbb{R}^N$, що містить точку x_0 виконується

$$\int_{\omega_{x_0} \cap \Omega} |f^n(x)|^2 \rho dx \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Справді, припустимо, що для кожної точки $x_0 \in \bar{\Omega}$ існує деяка відкрита куля ω_{x_0} для якої $x_0 \in \omega_{x_0} \subset \mathbb{R}^N$ і

$$\int_{\omega_{x_0} \cap \Omega} |f^n(x)|^2 \rho dx \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

$\bar{\Omega}$ є компактом і $\bar{\Omega} \subset \bigcup_{x_0 \in \bar{\Omega}} \omega_{x_0}$. З кожного відкритого покриття компактної множини можна вибрати скінченне підпокриття, отже існують $\{x_1, \dots, x_p\} \subset \bar{\Omega}$ такі, що $\bar{\Omega} \subset \bigcup_{k=1}^p \omega_{x_k}$, але тоді

$$\begin{aligned} \|f^n\|_\rho^2 &= \int_{\Omega} |f^n(x)|^2 \rho dx \leq \\ &\leq \sum_{k=1}^p \int_{\omega_{x_k} \cap \Omega} |f^n(x)|^2 \rho dx \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty, \end{aligned}$$

отримаємо протиріччя. Далі для визначеності вважаємо, що $\{f^n\}$ сингулярна для U в точці λ (інший випадок розглядається аналогічно).

Нехай $\alpha \in C^\infty(\mathbb{R}^N)$, $0 \leq \alpha(x) \leq 1$, $x \in \mathbb{R}^N$. Припустимо, що $\text{supp } \alpha \subset B(x_0, R)$, $\alpha(x) = 1$, $x \in \bar{B}(x_0, r)$ для деяких $0 < r < R < +\infty$.

Легко бачити, що принаймні для деякої підпослідовності

$$\inf_{k \geq 1} \int_{\Omega} |\alpha f^{n(k)}|^2 \rho dx > 0.$$

Не обмежуючи загальності вважаємо, що

$$\inf_{n \geq 1} \int_{\Omega} |\alpha f^n|^2 \rho dx > 0,$$

і розглянемо

$$h^n := \frac{\alpha f^n}{\|\alpha f^n\|}, \quad n \geq 1.$$

Зрозуміло, що $\text{supp } h^n \subset B(x_0, R)$. Більш того з компактності комутатора $[U, \alpha]$ випливає, що h^n сингулярна для U в точці λ . Зауважимо, що така послідовність побудована для довільного додатного R . Останнє дозволяє використати діагональну процедуру Кантора і побудувати послідовність g^n сингулярну для U в точці λ таку, що $\text{supp } g^n \subset B(x_0, 1/n)$. Враховуючи неперервність матричної функції B та компактність комутатора $[P, \beta]$ для довільної неперервної функції β тепер неважко показати, що g^n буде сингулярною і для оператора U_{x_0} . Звідси випливає (13), що і завершує доведення теореми.

3 Висновки

Знайдено істотний спектр класу матричних нееліптичних диференціальних оператора пов'язаного з моделями магнітогідродинаміки.

Список використаних джерел

1. Birman M. S., Solomyak M. Z. Spectral Theory of Self-Adjoint Operators in Hilbert Space. - Leningrad: Izdat. Leningrad. Univ., 1980. - 264 p. (in Russian)
2. Grinyk Yu. M., Konstantinov A. Yu. On the essential spectrum of one boundary problem // Dopovidi Akad. Nauk Ukrain. - 2002. - № 7. - P. 12–16. (in Russian)
3. Grinyk Yu. M. The essential spectrum of one matrix differential operator // Visn., Ser. Fiz.-Mat. Nayky, Kyiv Univ. im. Tarasa Shevchenka. - 2003. - № 9. - P. 9–13. (in Ukrainian)
4. Kato T. Perturbation Theory for Linear Operators. - Moscow: Mir, - 1972. - 739 p. (in Russian)
5. Konstantinov A. Yu. On the Essential Spectrum of a Class of Matrix Differential Operators // Functional Analysis and Its Applications - 2002. - № 3 **36**. - P. 76–78.
6. Kopachevsky N. D., Krein S. G., Ngo Zuy Kan Operator Methods in Linear Hydrodynamics: Evolution and Spectral Problems. - Moscow: Nauka, - 1989. - 416 p. (in Russian)
7. Temam R. Navier-Stokes equations. - Moscow: Mir, - 1981. - 408 p. (in Russian)
8. Faierman M., Mennicken R., Möller M., The essential spectrum of a system of singular ordinary differential operators of mixed order; Part II: The generalization of Kako's problem // Math. Nachr. - 2000. - no. 209. - P. 55–81.
9. Langer H., Möller M. The essential spectrum of a non-elliptic boundary value problem // Math. Nachr. - 1996. - no. 178. - P. 233–248.
10. Raikov G. D. The spectrum of an ideal magnetohydrodynamic model with translational symmetry // Asymptotic Analysis. - 1990. - no. 3. - P. 1–35.

Надійшла до редколегії 20.08.2013

УДК 532.5

Краснопольська Т.С.¹, д.ф.-м.н., с.н.с.,
Спектор В.М.¹, інженер

Експериментальні дослідження збудження хрестоподібних хвиль

Побудовану нову математичну модель збудження хрестоподібних хвиль на вільній поверхні рідини у прямокутному каналі скінченної довжини використано для моделювання експериментально отриманих резонансних хрестоподібних хвиль. Показано добре співпадання хрестоподібних хвиль з експериментальними хвилями у прямокутних скінченних каналах.

Ключові слова: хвилі на вільній поверхні рідини, хрестоподібні хвилі, вимушені хвилі.

¹Інститут гідромеханіки Національної Академії Наук України, 03068, м. Київ, вул. Желябова, 8/4, e-mail: t.krasnopol'skaya@tue.nl
e-mail: v.m.spektor@gmail.com

T. S. Krasnopol'skaya¹, Dr. Sc. (Phys.- Math.),
V. M. Spektor¹, jun. res.

Experimental study of cross-waves excitation

A new mathematical model of cross-waves generation in fluid free surface in a rectangular channel of finite dimensions was used for modeling of experimental resonant cross-waves. A good correspondence of theoretical cross-waves with experimentally obtained waves in a rectangular channel of finite dimensions was shown.

Key Words: waves in fluid free surface, cross-waves, forced waves.

¹ Institute of Hydromechanics National Academy of Sciences of Ukraine, 03068, Kyiv, Str. Zhelyabova, 8/4, email: t.krasnopol'skaya@tue.nl
e-mail: v.m.spektor@gmail.com

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

Вступ

Хрестоподібні хвилі - це хвилі, перпендикулярні до напрямку руху хвилепродуктора. Хоча вони добре відомі принаймні з відомої роботи М. Фарадея 1831 року [1], їх аналіз супроводжується великими математичними труднощами, які викликані тим фактом, що лінеаризовані рівняння не описують механізм їх виникнення і передавання енергії від руху хвилепродуктора в такого роду хвилі.

Хрестоподібні хвилі можуть виникати під час руху хвилепродуктора, який не залежить від поперечної координати, скажімо, від ширини каналу (координати y на рис. 1), коли коливання хвилепродуктора відбуваються вздовж каналу (вздовж координати x на рис. 1). В цьому випадку лінеаризовані рівняння не містять членів, які відповідають передачі енергії від хвилепродуктора в хрестоподібні хвилі, а отже, вони (хвилі) не повинні існувати. Тим не менш вони на практиці (в експерименті) спостерігаються та існують. В експериментах по збудженню хрестоподібних хвиль хвилепродуктор коливається з частотою,

половина значення якої близьке до власної частоти хрестоподібних хвиль. Це свідчить про реалізацію параметричного резонансу, тобто механізм збудження хрестоподібних хвиль - реалізація умов параметричного резонансу.

В нашій попередній роботі [2] вперше було показано існування хрестоподібних хвиль без врахування інших поверхневих хвиль в разі, коли геометрія басейну така, що коливання середнього рівня нехтовно малі. Всі попередні дослідження Гарретта, Джонса та Майлса [3, 4, 5] вказували, що саме взаємодія хрестоподібних хвиль з основними базовим рухом вільної поверхні рідини, (базовими хвилями вимушеного резонансу), яке безпосередньо збуджується хвилепродуктором, передає енергію хвилепродуктора в хрестоподібні хвилі. Безумовно, такого роду взаємодія також створює канал перекачки енергії від хвилепродуктора в хрестоподібні хвилі. Але і без врахування такої взаємодії ці хвилі збуджуються та існують. Механізм генерації хрестоподібних хвиль при наявності суттєвих коливань середнього рівня рідини в басейні вперше пояснено Гарреттом [3]

в 1970 році. Він виділив коливання середнього рівня, а поверхневі хвилі розклав в ряди Фур'є по довжині і ширині басейну. Застосовуючи процедуру Бубнова - Гальоркіна для амплітуди хвилі, яку він розглядав як основну з хвильовими числами $m = 0$ (по ширині) та $n = 1$ (по довжині басейну x (Рис.1)), він після лінеаризації рівнянь відносно малої амплітуди хвилі отримав рівняння Мат'є для амплітуди цієї хвилі. З цього рівняння він зробив висновок про можливість існування хвилі з половиною частотою хвилі хвилепродуктора при наявності коливань середнього рівня. Коливання середнього рівня в силу виконання закону збереження маси рідини повинні існувати завжди. Однак їх амплітуда може бути нехтовно малою, що залежить від відношення довжини басейну до його глибини. Чим це відношення більше, тим менше амплітуда коливань середнього рівня. При відношенні, близькому до 10 вони стають наступного порядку малості, тобто нехтовно малі. Тому в 1972 р. Дж. Махоні [6] переглянув теорію Гарретта, показав, що для довгих басейнів вона непридатна. Він створив теорію генерації хрестоподібних хвиль, коли є взаємодія змущених хвиль і хрестоподібних (що генеруються біля хвилепродуктора). Махоні розглядав вже нелінійні граничні умови, на хвилепродукторі також. Він, однак, розглядав дуже довгий басейн, для якого врахував умови випромінювання, коли $x = \infty$. Махоні, як і Гарретт, розглядав механізм нестійкості хвиль чи коливань, які не залежать від координати вздовж хвилепродуктора, тобто від координати по ширині басейну y (Рис.1), по якій і генеруються хрестоподібні хвилі. Їх нестійкість призводить до генерації хрестоподібних хвиль. Махоні використовував, як головні коливання поверхні рідини, такі, які відповідають славнозвісному розв'язку 1929 року Хавелока для нескінченного басейну [7]. Ми ж розглядаємо генерацію хрестоподібних хвиль в басейні довгому, але скінченних розмірів. Крім того, як відзначив А. Джонс [4], Махоні лінеаризував рівняння відносно амплітуди хрестоподібних хвиль, опускаючи члени, які є навіть більшими, ніж ті, що зберігаються, аргументуючи це тим, що вони не впливають на резонанс. А. Джонс утримував всі нелінійні члени, але при цьому його розв'язок для хрестоподібних хвиль знайдено для нескінченно довгого каналу. Крім того, змущені хвилі, що безпосередньо збуджуються при застосуванні метода розкладання по малому параметру

($\varepsilon = a\omega^2 / g$) виявляються на порядок більш значними, ніж хрестоподібні, що як ми покажемо далі не відповідає дійсності. В роботах Ліхтера та його учнів [8] розглянуто хрестоподібні хвилі для малих хвильових параметрів по ширині басейну, який є напівнескінченим, що дозволяє застосувати розв'язок Хавелока (1929). У вказаних роботах розглядалось зразу декілька хрестоподібних хвиль, частоти яких близькі. Дж. Майлс [5] застосував варіаційний метод для отримання розв'язку для хрестоподібних хвиль в прямокутному басейні. При цьому він зніс граничну умову рівності нулю швидкості на дні басейну на нескінченість, тобто розглядав нескінченно глибокий канал ($4\pi h > b$). Ми ж будемо розглядати хрестоподібні хвилі в прямокутному басейні скінченних розмірів.

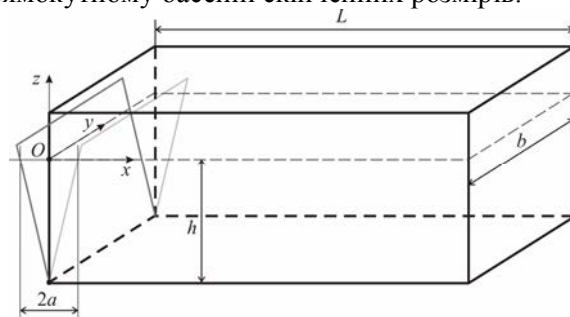


Рис. 1. Басейн з хвилепродуктором

Лабораторний експеримент

Експериментальні спостереження за хрестоподібними хвилями проводилися в дослідному басейні Інституту гідромеханіки НАНУ. Басейн мав розміри: довжина $L = 50$ м, ширина $b = 6,8$ м і глибина $3,5$ м. Експерименти проводились при заповненні басейну на глибину $h = 2,5$ м. Схематично басейн з хвилепродуктором представлено на рис. 1. Введемо декартову систему координат з початком в точці 0 на незбудженій поверхні рідини. Хвилепродуктор розташований в одному кінці басейну при $x = 0$. Переміщення хвилепродуктора в напрямку осі $\vec{x}$ описуються функцією

$$u(z, t) = F(z) \sin(\omega t) = \left(a + \frac{az}{h} \right) \sin \omega t, \quad (1)$$

де $2a$ - розмах коливань хвилепродуктора на поверхні рідини, $\omega = 2\pi f_e$ - кругова частота. При експериментальних дослідженнях частота хвилепродуктора змінювалась в діапазоні $0 < f_e < 2,5$ Гц. При відносно низьких частотах

f_e збуджувались лише хвилі в напрямку x , потім при збільшенні f_e - і в напрямку y , тобто хрестоподібні хвилі. Хвилі в напрямку руху хвилепродуктора мають вигляд, показаний на фотографії рис. 2. При $f_e > 1,5$ Гц спостерігались хрестоподібні хвилі. Так на рис. 3 показано хрестоподібні хвилі поблизу хвилепродуктора при $f_e = 2,27$ Гц. При цьому сторчові хрестоподібні хвилі, які мають амплітуди, якщо порівняти фотографії на рис. 2 і 3, що перевищують амплітуди в напрямку x більш як в 5 разів, мають частоти, близькі до $\frac{1}{2}f_e$, а саме 1,15 Гц.

На фотографії, що представлена на рис. 4, показано слід на поверхні хвилепродуктора, який залишили хрестоподібні хвилі після першого експерименту в басейні, коли на початку експерименту водний слід був горизонтальним. Мокрий слід ми спеціально посилили пунктирною лінією. З рис. 4 можна зробити висновок, що в напрямку ширини, тобто координати y , спостерігалось 10 півхвиль, тобто така форма коливаль, коли в напрямку y реалізується форма, яка має

$$\cos \frac{10\pi}{b} y = \cos \frac{5(2\pi)}{b} y. \quad (2)$$

Вимірювання частоти хрестоподібних хвиль показало, що їх частота дорівнює 1,15 Гц, а власна частота коливаль по власній моді $\cos \frac{10\pi}{b} y \cos \frac{0\pi}{L} x = \cos \frac{10\pi}{b} y$ така, що має $f_{010} = 1,07$ Гц.

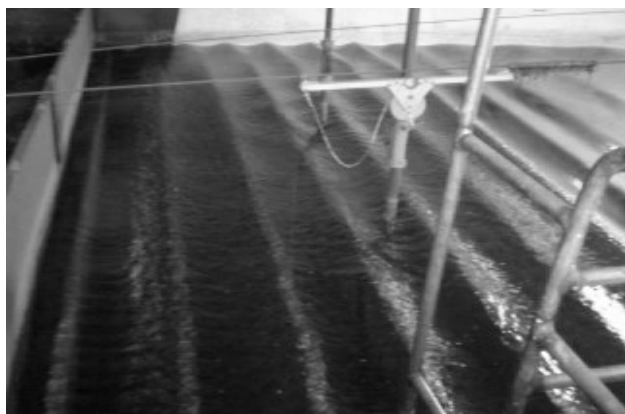


Рис. 2. Фотографія осесиметричних хвиль.

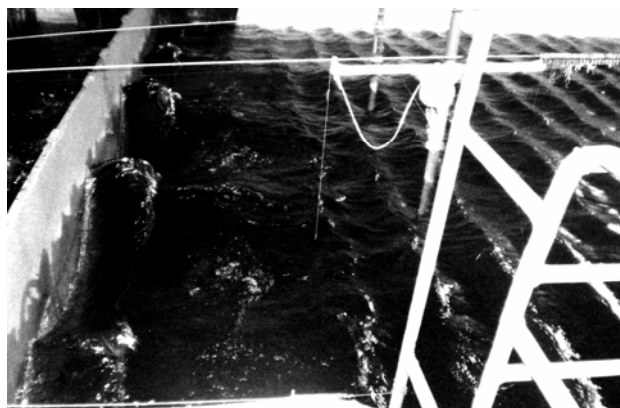


Рис.3. Фотографія хрестоподібних хвиль біля хвилепродуктора.

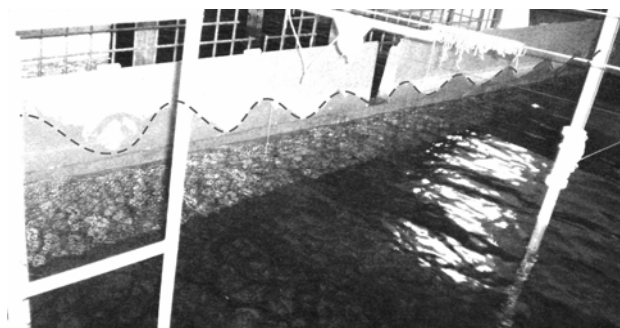


Рис. 4. Фотографія сліду хрестоподібних хвиль на хвилепродукторі.

На Рис.5 представлено в прямокутнику 6,8 x 6,8 для порівняння з експериментально спостереженою формою хвиль (Рис.2) відповідну власну моду осесиметричних вимушених хвиль виду

$$\zeta_{150,0}(x) = \cos(150\pi \frac{x}{L}), \quad (3)$$

якій відповідає власна частота $\omega_{150,0} = 2\pi f_{150,0}$ коли $f_{150,0} = 1,53$ Гц. Зазначимо, що власні частоти поверхневих хвиль у прямокутному басейні визначаються за формулою [2]

$$\omega_{n,m} = (gk_{n,m}thk_{n,m}h)^{1/2}, k_{n,m} = (\frac{n^2\pi^2}{L^2} + \frac{m^2\pi^2}{b^2})^{1/2}$$

для власної моди

$$\zeta_{n,m} = \cos(\frac{n\pi x}{L}) \cos(\frac{m\pi y}{b}). \quad (4)$$

Власна мода хрестоподібних хвиль $\zeta_{40,10}(x,y)$ має частоту з $f_{40,10} = 1,143$ Гц. При цьому $2f_{40,10} \approx f_e = 2,27$ Гц, тобто виконується вимога головного параметричного резонансу, при якій хрестоподібні хвилі і реалізуються.

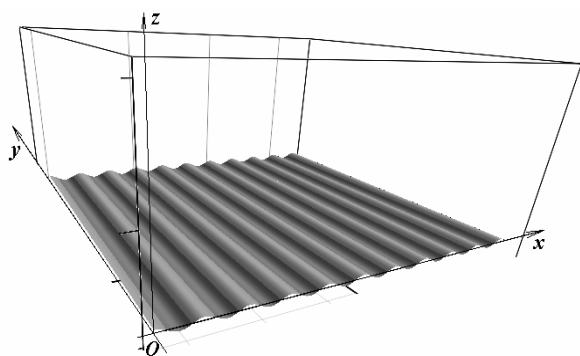


Рис.5 Графік вимушених осесиметричних хвиль (3).

Якщо до хрестоподібних хвиль (4) додати резонансні вимушені хвилі, які мають власну частоту рівну 2,1 Гц (що досить близька до частоти хвилепродуктора 2,27 Гц) и мають

форму $\zeta_{275,0} = \cos \frac{275\pi x}{L}$, то коливання вільної поверхні басейну матимуть вигляд

$$\zeta(x, y) \approx \zeta_{40,10}(x, y) + 0,2\zeta_{275,0}(x), \quad (5)$$

при цьому враховується, що амплітуди хрестоподібних хвиль у 5 разів більші.

З експериментальних досліджень звісно [1, 3, 4, 5], що хрестоподібні хвилі локалізуються біля хвилепродуктора і швидко затухають, тому на

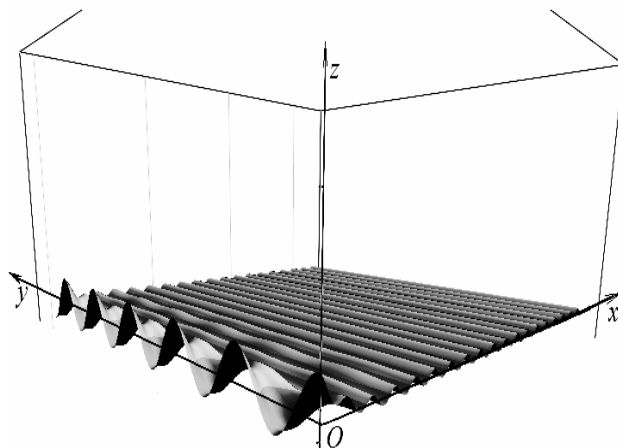


Рис. 6 Хрестоподібні та вимушені хвилі, моделюючі хвилі при експерименті (Рис.2).

Рис.6 ми надали графік резонансних хвиль у вигляді

$$\zeta(x, y) = \cos\left(\frac{40\pi x}{L}\right)\cos\left(\frac{10\pi y}{b}\right)e^{-2x} + 0,2\cos\left(\frac{275\pi x}{L}\right).$$

Порівняння фотографій вільної поверхні басейну (Рис.3) з резонансними хвилями на Рис.6 свідчить про добре співпадання теоретичних моделей з результатами експериментальних спостережень.

Список використаних джерел

1. Faraday M. On a peculiar class of acoustical figures and on certain forms assumed by groups of particles upon vibrating elastic surfaces / M. Faraday // Phil. Trans. R. Soc. Lond. – 1831. – A 121. – 299–340.
2. Krasnopolskaya T.S., Spektor V.M. Cross-waves in a rectangular channel of finite dimensions // Visn., Ser. Fiz.-Mat. Nauky, Kyiv Univ. im. Tarasa Shevchenka. – 2012. – N 1. – P. 93-100. (in Ukrainian).
3. Garrett C. J. R. Cross waves / C. J. R. Garrett // J. Fluid Mech. – 1970. – 41. – P. 837–849.
4. Jones A. F. The generation of cross-waves in a long deep channel by parametric resonance / A. F. Jones // J. Fluid Mech. – 1984. – 138. – P. 53–74.
5. Miles J. W. Parametrically excited, standing cross-waves / J. W. Miles // J. Fluid Mech. – 1988. – 186. – P. 119–127.
6. Mahony J. J. Cross-waves. Part 1. Theory / J. J. Mahony // J. Fluid Mech. – 55, 2. – P. 229–244.
7. Havelock T. H. Forced surface waves on water / T. H. Havelock // Phil. Mag. – 1929. – 8 (7). – P. 569–576.
8. Ayanle H. Spanwise modal competition in cross-waves / H. Ayanle, A. J. Bernoff, S. Lichter // Physica D. – 1990. – 43. – P. 87-104.

Надійшла до редколегії 31.08.13

УДК 519.9

Паткін Є. Д.¹, аспірант

Приклад побудови мартингальних мір

Для певного класу еквівалентних мартингальних мір доведено щільність множини еквівалентних мартингальних мір, у яких похідна Радона-Нікодима обмежена як згори, так і знизу

Ключові слова: мартингальна міра, мартингал, ризиковий актив.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4е, e-mail: patkin88@mail.ru

I. D. Patkin¹, Postgraduate Student

Example of construction martingale measures

For some class of equivalent martingale measures were proved density of set equivalent martingale measures with bounded Radon-Nikodim densities.

Key words: martingale measure, martingale, risk asset.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4e, e-mail: patkin88@mail.ru

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

Вступ

Задача про те, чи є щільною є множина мартингальних мір з обмеженою похідною Радона-Нікодима виникла після того як у роботі Даланга-Мортон-Вілінгера [1] було доведено відсутність арбітражу. Лише в роботі Кабанова, Стрікера [2] вперше, використовуючи стохастичне числення, цей факт було встановлено. Доведення є занадто складним і непрозорим. В даній роботі таку щільність множини мартингальних мір з обмеженими похідними Радона-Нікодима встановлено для однієї простої моделі еволюції ризикового активу явною побудовою. В подальшому такими класами випадкових процесів апроксимуватимемо складні випадкові процеси.

На ймовірнісному просторі $\{\Omega, \mathfrak{F}, P_0\}$ розглядаємо еволюцію ризикового активу, заданого законом

$$S_n = (1 + \rho_n)S_{n-1}, \quad n = \overline{1, N}, \quad (*)$$

де ρ_n набуває значень з інтервалу $(-1, c], 0 < c < \infty$ і є випадковою величиною, а неризиковий актив еволюціонує за законом $B_n \equiv 1, n = \overline{1, N}$. Тут

$$\Omega = \prod_{i=1}^N D_i, \quad D_i = (-1, c], \quad \omega = \{x_1, \dots, x_N\} \in \Omega.$$

$$P_0(A) = \int \prod_{i=1}^N dF_i(x_i), \quad F_i(x) = P(\rho_i \leq x), i = \overline{1, N}$$

Означимо потік подій $\mathfrak{F}_n = \mathfrak{F}\{\rho_1, \dots, \rho_n\}$,

породжений випадковими величинами $\rho_1, \dots, \rho_n$.

Нехай P - сукупність усіх мір, стосовно яких S_n є мартингал.

Теорема 1. Множина мартингальних мір непорожня, якщо існують борелеві функції $\varphi_i(x_i) \geq 0$ такі, що:

$$\begin{cases} \int_{-1}^c \varphi_i(x_i) dF_i(x_i) = 1, & i = \overline{1, N} \\ \int_{-1}^c \varphi_i(x_i) x_i dF_i(x_i) = 0, & i = \overline{1, N} \end{cases} \quad (1)$$

$$Q(A) = \int_A f(\omega) dP_0, f(\omega) = \prod_{i=1}^N \varphi_i(\rho_i),$$

$$f(\omega) \geq 0, P_0(f(\omega) = 0) = 0.$$

Сім'я борелевих функцій $0 \leq \varphi_n(x), x \in (-1, c]$ є такою, що

$$E^{P_0} \varphi_n(\rho_n) \rho_n = 0, \quad (3)$$

$$E^{P_0} \varphi_n(\rho_n) = 1, \quad (4)$$

$$E^{P_0} \{f(\omega) | \rho_n\} = \varphi_n(\rho_n), n = \overline{1, N}. \quad (5)$$

Доведення. Нехай Q - мартингальна міра, еквівалентна до P_0 , тоді існує така $f(\omega)$, що

$$P(f(\omega) = 0) = 0, E^{P_0} f(\omega) = 1. \text{ З умови}$$

мартингальності випливає, що

$$0 = E^Q \{\rho_n S_{n-1} | \mathfrak{T}_{n-1}\} = E^Q \{\rho_n | \mathfrak{T}_{n-1}\} S_{n-1}. \quad (6)$$

Нехай $A \in \mathfrak{T}_{n-1}$, тоді

$$\int_A E^Q \{\rho_n | \mathfrak{T}_{n-1}\} dQ = \int_A \rho_n dQ = \int_A \rho_n f(\omega) dP_0 \quad (7)$$

З умов теореми випливає, що

$$f(\omega) = \prod_{i=1}^N \varphi_i(\rho_i), \quad (8)$$

де φ_i задовольняють умови 1) і 2). Тоді

рівність (7) можна продовжити наступним чином:

$$\begin{aligned} \int_A \rho_n \varphi_n(\rho_n) \prod_{i=1}^{n-1} \varphi_i(\rho_i) dP_0 &= \\ &= \int_A E^{P_0} \{\rho_n \varphi_n(\rho_n) \prod_{i=1}^{n-1} \varphi_i(\rho_i) | \mathfrak{T}_{n-1}\} dP_0 = \\ &= \int_A \prod_{i=1}^{n-1} \varphi_i(\rho_i) E^{P_0} \rho_n \varphi_n(\rho_n) dP_0 = \\ &= E^{P_0} \rho_n \varphi_n(\rho_n) \int_A \prod_{i=1}^{n-1} \varphi_i(\rho_i) dP_0 = \\ &= E^{P_0} \rho_n \varphi_n(\rho_n) \int_A dQ \end{aligned} \quad (9)$$

Отже, з (7), (8), (9) отримаємо, що

$$E^Q \{\rho_n | \mathfrak{T}_{n-1}\} = E^{P_0} \rho_n \varphi_n(\rho_n) = 0. \text{ Таким чином,}$$

рівність (6) у цьому випадку виконується.

Теорему доведено.

Теорема 2. Нехай

$$\int_{-1}^0 x dF_n(x) < 0, \int_0^c x dF_n(x) > 0, \quad (10)$$

Тоді множина усіх мартингальних мір Q

таких, що

$$0 < l < \frac{dQ}{dP^0} < L < \infty \quad (11)$$

є щільною в загальній варіаційній топології [1]

в множині розглядуваних мартингальних мір.

Доведення. З умови (10) випливає, що

сукупність мартингальних мір непорожня.

Справді, означимо

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \frac{a_n}{d} > 0, & -1 < x \leq 0 \\ \frac{b_n}{d} > 0, & 0 < x < c \end{cases}$$

визначивши a_n і b_n з умов

$$\begin{aligned} a_n \int_{-1}^0 x dF_n(x) + b_n \int_0^c x dF_n(x) &= 0, \\ a_n \int_{-1}^0 dF_n(x) + b_n \int_0^c dF_n(x) &= d. \end{aligned}$$

Такі $a_n > 0$ і $b_n > 0$ існують, бо

$$\int_{-1}^0 x dF_n(x) < 0, \int_0^c x dF_n(x) > 0. \text{ Тоді виконуються}$$

умови 1), 2) для введених функцій

$\varphi_n(x), n = \overline{1, N}$. Тому на підставі Теорема 1

міра $Q(A) = \int \prod_{i=1}^N \varphi_i(\rho_i) dP_0$ є еквівалентною

мартингальною мірою.

Отже, доведено щільність множини еквівалентних мартингальних мір з обмеженою похідною Радона-Никодима. Нехай тепер сукупність функцій $\varphi_n(x)$ задовольняють

умови теорема 1. Тоді $Q(A) = \int \prod_{i=1}^N \varphi_i(\rho_i) dP_0$ –

мартингальна міра. Покажемо, що існує послідовність мартингальних мір $Q^k(A)$ таких,

що $0 < l < \frac{dQ^k(A)}{dP^0} < L < \infty$ і в рівномірній

метриці $Q^k(A) \rightarrow Q(A), k \rightarrow \infty$, тобто

$\rho(Q^k, Q) = \sup_{A \in \mathfrak{F}} |Q^k(A) - Q(A)| \rightarrow 0, k \rightarrow \infty$. Нехай

$$\varphi_i^k(x) = \begin{cases} \varphi_i(x), & \text{при } \varphi_i(x) \leq k, \\ k, & \text{при } \varphi_i(x) > k. \end{cases}$$

Тоді

$$\begin{aligned} \int_{-1}^c x \varphi_i^k(x) dF_i(x) &= \int_{\varphi_i \leq k} x \varphi_i(x) dF_i(x) + \\ &+ k \int_{\varphi_i > k} x dF_i(x) = \\ &= - \int_{\varphi_i > k} x \varphi_i(x) dF_i(x) + k \int_{\varphi_i > k} x dF_i(x) = \\ &= \int_{\varphi_i > k} x[k - \varphi_i(x)] dF_i(x). \end{aligned}$$

Визначимо додатні числа a_i^k і b_i^k з умови

$$\begin{aligned} a_i^k \int_{-1}^0 x dF_i(x) + b_i^k \int_0^c x dF_i(x) &= \\ &= - \int_{\varphi_i > k} x[k - \varphi_i(x)] dF_i(x). \end{aligned}$$

Звідси

$$b_i^k = \frac{-a_i^k \int_{-1}^0 x dF_i(x) - \int_{\varphi_i(x) > k} x[k - \varphi_i(x)] dF_i(x)}{\int_0^c x dF_i(x)}.$$

Покладемо

$$\begin{aligned} a_i^k &= \frac{\frac{1}{k} + \left| \int_{\varphi_i(x) > k} x[k - \varphi_i(x)] dF_i(x) \right|}{-\int_{-1}^c x dF_i(x)}, \\ b_i^k &= \frac{\frac{1}{k} + \left| \int_{\varphi_i(x) > k} x[k - \varphi_i(x)] dF_i(x) \right|}{\int_0^c x dF_i(x)} - \\ &- \frac{\int_{\varphi_i(x) > k} x[k - \varphi_i(x)] dF_i(x)}{\int_0^c x dF_i(x)}. \end{aligned}$$

Тоді

$$a_i^k \geq \frac{1}{k[-\int_{-1}^c x dF_i(x)]} > 0, \quad b_i^k \geq \frac{1}{k \int_1^c x dF_i(x)} > 0. \text{ По}$$

зглянемо сукупність функцій

$$\bar{\varphi}_i^k(x) = \frac{\varphi_i^k(x) + \varphi_i^{0,k}(x)}{\int_{-1}^c [\varphi_i^k(x) + \varphi_i^{0,k}(x)] dF_i(x)}, \quad i = \overline{1, N},$$

тут

$$\varphi_i^{0,k}(x) = \begin{cases} a_i^k, & -1 \leq x \leq 0, \\ b_i^k, & 0 < x \leq c. \end{cases},$$

Причому

$$\begin{aligned} \frac{\min\{a_i^k, b_i^k\}}{\int_{-1}^c [\varphi_i^k(x) + \varphi_i^{0,k}(x)] dF_i(x)} &\leq \bar{\varphi}_i^k(x) \leq \\ &\leq \frac{k + \max\{a_i^k, b_i^k\}}{\int_{-1}^c [\varphi_i^k(x) + \varphi_i^{0,k}(x)] dF_i(x)}. \end{aligned}$$

Очевидно, що

$$1) E^{P_0} \bar{\varphi}_i^k(\rho_i) \rho_i = 0, \quad 2) E^{P_0} \bar{\varphi}_i^k(\rho_i) = 1, \quad i = \overline{1, N}.$$

Міра

$$Q^k(A) = \int \prod_{i=1}^N \bar{\varphi}_i^k(\rho_i) dP_0$$

$$\text{є такою, що } \prod_{i=1}^N l_i^k \leq \frac{dQ^k(A)}{dP^0(A)} \leq \prod_{i=1}^N L_i^k,$$

$$l_i^k = \frac{\min\{a_i^k, b_i^k\}}{\int_{-1}^c [\varphi_i^k(x) + \varphi_i^{0,k}(x)] dF_i(x)},$$

$$L_i^k = \frac{\max\{a_i^k, b_i^k\}}{\int_{-1}^c [\varphi_i^k(x) + \varphi_i^{0,k}(x)] dF_i(x)}.$$

Далі

$$\begin{aligned} \sup_{A \in F} \left| \int_A \varphi_i(\rho_i) dP_o - \int_A \bar{\varphi}_i^k(\rho_i) dP_o \right| &\leq \\ &\leq \int_A \left| \varphi_i(\rho_i) - \bar{\varphi}_i^k(\rho_i) \right| dP_o \leq \int_{\Omega} \left| \varphi_i(\rho_i) - \bar{\varphi}_i^k(\rho_i) \right| dP_o = \end{aligned}$$

$$= \int_{-1}^c \left| \varphi_i(x) - \bar{\varphi}_i^k(x) \right| dF_i(x) \rightarrow 0$$

бо $\varphi_i(x) - \bar{\varphi}_i^k(x) \rightarrow 0, k \rightarrow \infty$ і існує інтегрована мажоранта

$$\begin{aligned} \left| \varphi_i(x) - \bar{\varphi}_i^k(x) \right| &= \frac{\left| \varphi_i(x) \int_{-1}^c \varphi_i^k(x) dF_i(x) \right.}{\int_{-1}^c [\varphi_i^k(x) + \varphi_i^{0,k}(x)] dF_i(x)} + \\ &+ \frac{\left| \int_{-1}^c \varphi_i^{0,k}(x) dF_i(x) - \varphi_i^k(x) - \varphi_i^{0,k}(x) \right|}{\int_{-1}^c [\varphi_i^k(x) + \varphi_i^{0,k}(x)] dF_i(x)} \leq \\ &\leq \frac{2\varphi_i(x) + \max\{a_i^k, b_i^k\} \varphi_i(x) + \varphi_i(x) + a_i^k + b_i^k}{\frac{1}{2}} \leq \\ &\leq \frac{4\varphi_i(x) + 2}{\frac{1}{2}} = 2(4\varphi_i(x) + 2) \end{aligned}$$

Якщо $k > k_0$. Далі

$$\begin{aligned} \sup_{A \in F} \left| \int_A \left[\prod_{i=1}^N \varphi_i(\rho_i) - \prod_{i=1}^N \bar{\varphi}_i^k(\rho_i) \right] dP_0 \right| &\leq \\ &\leq \sum_{i=1}^N \sup_{A \in F} \left| \int_A \left[\prod_{i=1}^N \varphi_i(\rho_i) - \bar{\varphi}_i^k(\rho_i) \right] dP_0 \right| \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Теорему доведено.

Зауваження: В доведенні ніде не

використовувалось припущення

$$-1 < \rho_n < c < \infty, \text{ тобто можливо, що } c = \infty.$$

Список використаних джерел

1. Dalang R. C., Morton A., Willinger W.. Equivalent martingale measures and no-arbitrage in stochastic securities market models. Stochastic and stochastic reports, 29 (1990), p. 185-201.
2. Yu. Kabanov and C. Striker. On equivalent martingale measures with bounded densities, UMR 6623, Laboratoire de Mathematiques, Universite de Franhe-Comte 16 Ronte de Gray, F-25030 Besancon Cedex, FRANCE.

Надійшла до редколегії 02.10.13

УДК 517.98

Романенко В.М.¹, к.ф.-м.н.

Про обмежені розв'язки диференціального рівняння з G-секторіальним операторним коефіцієнтом.

В статті доведено умови існування та єдиності обмеженого розв'язку лінійного диференціального рівняння першого порядку з G-секторіальним операторним коефіцієнтом для випадку локально-гельдерової відомої функції, які були відомі у випадку заданої гельдерової функції. Доведено можливість наближення цього розв'язку розв'язками відповідних крайових задач і знайдена оцінка точності наближення.

Ключові слова: диференціальне рівняння, G-секторіальний оператор, апроксимація.

¹Національний університет харчових технологій, 01601, м. Київ, вул. Володимирська, 68, e-mail: romvik1@mail.ru

V. N. Romanenko¹, Dr.(Physics and Mathematics)

On the bounded solutions of a differential equation with the G-sectorial operator coefficient.

In the paper we prove existence and uniqueness of a limited deprivation linear first order differential equation with G-sectorial operator coefficient for locally-gelderovoi known function that were known in the case of a given gelderovoi function. Proved the feasibility of this approach decisions of the relevant solutions of boundary value problems and an estimate of the accuracy of approximation.

Key Words: differential equation, G-sectorial operator, approximation.

¹ National University of Food Technologies, 01601, Kyiv, Volodimirska str., 68, e-mail: romvik1@mail.ru

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Перестюк М.О.

Вступ. Нехай $\mathbf{B}$ – комплексний банахів простір з нормою $\|\cdot\|$ і нульовим елементом $\vec{0}$. Наведемо потрібне надалі поняття G-секторіального оператора.

Означення 1 [1]. Будемо казати, що функція $G:[0,+\infty)\rightarrow(0,+\infty)$ належить до класу Ψ , якщо вона задовольняє такі умови:

a) функція G незростаюча на $[0,+\infty)$;

b) $G(t)\rightarrow 0, t\rightarrow +\infty$;

c) функція $\frac{1}{G}$ ліпшицева на $[0,+\infty)$.

Поряд з кожною функцією $G\in\Psi$ розглядатимемо функцію

$$H(t):=\frac{1}{t}G\left(\frac{1}{t}\right), t>0.$$

При цьому

$$G(t)=\frac{1}{t}H\left(\frac{1}{t}\right), t>0.$$

Означення 2 [1]. Нехай $G\in\Psi$. Лінійний оператор $T:D(T)\rightarrow\mathbf{B}$, де $D(T)\subset\mathbf{B}$, назовемо G-

секторіальним, якщо існують такі сталі $a\in\mathbf{R}$ і $\varphi\in\left(0,\frac{\pi}{2}\right)$, що для множини

$$S_{a,\varphi}:=\{z\in\mathbf{C}\mid z\neq a, |\arg(z-a)|<\varphi\}$$

виконуються умови:

$$1) \sigma(T)\subset S_{a,\varphi};$$

$$2) \exists M>0 \forall \lambda\notin S_{a,\varphi}:\|(T-\lambda I)^{-1}\|\leq MG(|\lambda-a|).$$

Для G-секторіальних операторів в роботі [1] визначено операторну експоненту та дробові степені оператора для степенів, що належать множині

$$\Omega_0=\left\{\alpha>0\mid\int_0^1 t^{\alpha-1}H(t)dt<+\infty\right\}.$$

Надалі нехай T – G-секторіальний оператор, що діє в $\mathbf{B}$, з областю визначення $D(T)$.

Зафіксуємо також функцію $f: \mathbf{R} \rightarrow \bigcup_{\beta \in \Omega_0} D(T^\beta)$,

яка задовольняє такі умови:

$$\alpha) \|f\|_\infty := \sup \{ \|f(t)\| \mid t \in \mathbf{R} \} < +\infty;$$

б) для кожного t_0 існують такі залежні від t_0 сталі $\beta \in \Omega_0$, $M > 0$, $\gamma > 0$, що

$$\forall t, s \in [t_0 - \gamma; t_0 + \gamma]: \|f(t) - f(s)\| \leq M |t - s|^\beta \quad (1)$$

Означення 3. Функція $x: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{B}$ називається відповідним f обмеженим розв'язком диференціального рівняння

$$x'(t) = Tx(t) + f(t), \quad t \in \mathbf{R}, \quad (2)$$

якщо $x \in C^1(\mathbf{R}, \mathbf{B})$, $\|x\|_\infty < +\infty$, для довільного $t \in \mathbf{R}$ $x(t) \in D(T)$ і виконується рівність (2).

Відзначимо, що абстрактне рівняння (2) має численні застосування, деякі з яких описані в [2].

У даній статті досліджується питання про існування та єдиність обмеженого розв'язку диференціального рівняння (2) та питання про апроксимацію цього розв'язку розв'язками відповідних задач Коші.

Відзначимо, що у випадку обмеженого оператора T та неперервної і обмеженої на $\mathbf{R}$ функції f відповідь на питання про існування і єдиність обмеженого розв'язку рівняння (2) містить відома теорема М. Г. Крейна [3, с.119]. У роботах [4-6] ця теорема узагальнювалася на випадок секторіального оператора T і обмеженої на $\mathbf{R}$ функції f , яка задовольняє глобальну умову Гельдера, в роботі [7] – на випадок секторіального оператора T і обмеженої на $\mathbf{R}$ функції f , яка задовольняє локальну умову Гельдера. Питання про апроксимацію єдиного обмеженого розв'язку диференціального рівняння (2) у випадку, коли f задовольняє глобальну умову Гельдера, досліджується в роботі [8], локальну умову Гельдера – в роботі [7].

Нехай спектр $\sigma(T)$ оператора T не перетинається з уявною віссю $i\mathbf{R} := \{it \mid t \in \mathbf{R}\}$. Нехай $\sigma_+(T)$, $\sigma_-(T)$ – частини спектра $\sigma(T)$, які містяться відповідно у правій та лівій півплощинах $\mathbf{C}$, причому $\sigma_\pm(T)$ – непорожні множини. Тоді $\sigma_-(T)$ – компактна, $\sigma_+(T)$ –

замкнена множина; простір $\mathbf{B}$ розкладається в пряму суму інваріантних відносно оператора T підпросторів $\mathbf{B}_\pm$; звуження $T_\pm$ оператора T на $\mathbf{B}_\pm$ мають відповідно спектри $\sigma_\pm(T)$; T_- – лінійний обмежений, T_+ – G -секторіальний оператори. Якщо $P_\pm$ – проектори в $\mathbf{B}$ відповідно на підпростори $\mathbf{B}_\pm$, $f_\pm(t) := P_\pm f(t)$, $t \in \mathbf{R}$, то відповідний функції f єдиний обмежений розв'язок x рівняння (2), зображується у вигляді

$$x(t) = x_+(t) + x_-(t), \quad t \in \mathbf{R},$$

де $x_\pm$ – відповідні функції $f_\pm$ єдині обмежені розв'язки диференціальних рівнянь

$$x'_-(t) = T_- x_-(t) + f_-(t), \quad t \in \mathbf{R}, \quad (3)$$

$$x'_+(t) = T_+ x_+(t) + f_+(t), \quad t \in \mathbf{R}. \quad (4)$$

Отже, поставлена задача відшукування та апроксимації обмеженого розв'язку зводиться до двох окремих задач для диференціальних рівнянь з обмеженим та G -секторіальним оператором відповідно. Розв'язок першої задачі добре відомий, тому не зменшуючи загальності в подальшому вважатимемо, що множина $\sigma(T)$ міститься у правій півплощині:

$$\sigma(T) \subset \{z \in \mathbf{C} \mid \operatorname{Re} z > 0\}.$$

Основні результати. Наведемо теорему, що узагальнює твердження з роботи [7].

Теорема 1. Нехай $1 \in \Omega_0(T)$. Тоді рівняння (2) має єдиний обмежений розв'язок x , який зображується у вигляді

$$x(t) = - \int_t^{+\infty} e^{T(t-s)} f(s) ds, \quad t \in \mathbf{R}. \quad (5)$$

Доведення. Інтеграли в (5) збігаються абсолютно, бо експоненти від оператора T коректно визначені при $t > 0$ і задовольняють такі умови (див. [1]):

$$\exists \varepsilon > 0 \quad \exists C > 0 \quad \forall t > 0: \|e^{-Tt}\| \leq CH(t)e^{-\varepsilon t}. \quad (6)$$

Зафіксуємо довільну точку $t_0 \in \mathbf{R}$ і число $\delta \in (0, 1)$. Тоді функцію, визначену рівністю (5) можна перетворити так:

$$x(t) = -\int_t^{t_0} e^{T(t-s)} f(s) ds - e^{T(t-t_0)} \int_{t_0}^{+\infty} e^{T(t_0-s)} f(s) ds,$$

$$t \in U_\delta := (t_0 - 1 - \delta, t_0 - 1 + \delta).$$

Позначимо

$$x_0(t) := -\int_t^{t_0} e^{T(t-s)} f(s) ds, \quad t \in U_\delta,$$

$$f_0 := -\int_{t_0}^{+\infty} e^{T(t_0-s)} f(s) ds.$$

Тоді

$$x(t) = x_0(t) + e^{T(t-t_0)} f_0, \quad t \in U_\delta.$$

При цьому внаслідок теореми 8 [1] функція x_0 задовольняє рівняння

$$x'_0(t) = T x_0(t) + f(t), \quad t \in U_\delta.$$

Крім того, за властивостями операторної експоненти

$$\left(e^{T(t-t_0)} \right)' = T e^{T(t-t_0)}, \quad t < t_0,$$

отже $x(t) \in D(T)$, $t \in U_\delta$ і

$$\begin{aligned} x'(t) &= x'_0(t) + T e^{T(t-t_0)} f_0 = T x_0(t) + f(t) + \\ &+ T e^{T(t-t_0)} f_0 = T x(t) + f(t), \quad t \in U_\delta. \end{aligned}$$

Враховуючи довільність точки $t_0 \in \mathbf{R}$, отримаємо, що функція (5) є розв'язком рівняння (2).

Крім того, внаслідок (6)

$$\|x(t)\| \leq \int_t^{+\infty} C H(s-t) e^{-\delta(s-t)} ds \cdot \|f\|_\infty = C_0 \cdot \|f\|_\infty,$$

звідки випливає обмеженість розв'язку (5).

Нарешті, єдиність розв'язку випливає зі звичайних міркувань (див. [3]).

Теорему 1 доведено.

Відзначимо, що доведена теорема узагальнює аналогічне твердження з роботи [9], отримане для випадку глобально гелдерових функцій.

Зафіксуємо $t_1 < t_2$. Рівнянню (3) відповідає задача Коші

$$\begin{cases} v'_-(t) = T_- v_-(t) + f_-(t), & t \geq t_1, \\ v_-(t_1) = \bar{0}, \end{cases} \quad (7)$$

в просторі $\mathbf{B}_-$, а рівнянню (4) – задача Коші

$$\begin{cases} v'_+(t) = T_+ v_+(t) + f_+(t), & t \leq t_2, \\ v_+(t_2) = \bar{0}, \end{cases} \quad (8)$$

в просторі $\mathbf{B}_+$.

Неважко перевірити, що розв'язки задач Коші (7), (8) мають вигляд

$$v_-(t) = \int_{t_1}^t e^{T_-(t-s)} P_- f(s) ds, \quad t \geq t_1, \quad (9)$$

$$v_+(t) = -\int_t^{t_2} e^{T_+(t-s)} P_+ f(s) ds, \quad t \leq t_2. \quad (10)$$

Покладемо

$$v(t) := v_+(t) + v_-(t), \quad t \in [t_1, t_2], \quad (11)$$

тоді справджується

Теорема 2. Нехай $1 \in \Omega_0(T)$, $\sigma(T) \cap i\mathbf{R} = \emptyset$.

Тоді існують такі сталі $c > 0$, $\delta > 0$, що для довільної функції $f: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{B}$, яка задовольняє умову (1), та відповідного їй розв'язку x рівняння (2) виконується оцінка

$$\begin{aligned} \forall t \in [t_1; t_2] : \|x(t) - v(t)\| &\leq \\ &\leq \left(\frac{c \|P_-\|}{\delta} e^{-\delta(t-t_1)} + \frac{c \|P_+\|}{\delta} e^{-\delta(t_2-t)} \right) \|f(t)\|_\infty, \end{aligned} \quad (12)$$

де $v(t)$, $t \in [t_1; t_2]$ визначається за допомогою формул (9)-(11).

Доведення. Внаслідок (6)

$$\begin{aligned} \exists C_+ > 0 \quad \forall t \leq t_2 : \|x_+(t) - v_+(t)\| &\leq \\ &\leq C \|P_+\| \|f\|_\infty \int_{t_2}^{+\infty} e^{-\delta(s-t)} H(s-t) ds \leq \\ &\leq C \|P_+\| \|f\|_\infty \int_t^{+\infty} e^{-\delta(s-t)} H(s-t) ds = \\ &= \frac{C_+ \|P_-\| e^{-\delta(t_2-t)}}{\delta} \|f\|_\infty. \end{aligned} \quad (13)$$

Аналогічно, скориставшись властивостями операторної експоненти для обмежених операторів матимемо:

$$\forall t \geq t_1 : \|x_-(t) - v_-(t)\| \leq \frac{c \|P_+\| e^{-\delta(t-t_1)}}{\delta} \|f\|_\infty. \quad (14)$$

З (13),(14) випливає оцінка (12).

Теорему 2 доведено.

Висновок:

У даній статті досліджено питання про існування та єдиність обмеженого розв'язку диференціального рівняння (2) з G-секторіальним операторним коефіцієнтом та питання про апроксимацію цього розв'язку розв'язками відповідних задач Коші.

Список використаних джерел

1. Gorodnii M. F. A generalization of the concept of sectorial operator / M. F. Gorodnii, A.V. Chaikovskiy // Sbornik:Mathematics. – 2006 . – V.197, No. 7. – P. 29-46.
2. Chaikovskiy A. V. About application of the theory of G-sectorial operators to the differential equations with partial derivatives / A.V. Chaikovskiy // Nonlinear oscillations. - 2012 . - V.15, No. 1. - P. 139-148.
3. Daletskiy Yu. L. Stability of solutions of the differential equations in Banach space / Yu.L. Daletskiy, M. G. Krain. – M.: Nauka, 1970. – 534 p.
4. Gorodnii M. F. Stability of bounded solutions of the differential equations with small parameter in Banach space / / Ukr. Mat. Zhurn. - 2003 . - 55, No. 7. - P. 889 - 900.
5. Dorogovtsev A. Ya. Bounded and periodic solutions of the operator equation of Rikkaty with unbounded operator / A.Ya. Dorogovtsev, T.A. Petrova // Differ. equations. – 1997 . – V. 33, No. 3. – P. 309 – 315.
6. Henri D. Geometrical theory of the semi-linear parabolic equations. – M: Mir, 1985. – 376 p.
7. Gorodnii M. F. About bounded solutions of the differential equation with sectorial operator coefficient / M. F. Gorodnii, V. N. Romanenko // Visnyk of the Kiev university, series physical and mathematical sciences. - 2004 . - V. 2. - P. 97-106.
8. Romanenko V. N. Approximation of bounded solutions of the differential and differential equations by solutions of the corresponding Cauchy problems // Visnyk of the Kiev university. - 2002. - Series: techn. sciences, No. 2. - P. 142 - 147.
9. Chaikovskiy A.V. Generalization of the theorem of Krain for G-sectorial operators / A.V. Chaikovskiy // Visnyk of the Kiev university. Series: physical and mathematical sciences. - 2009 . - V. 3 . – P. 49-50.

Надійшла до редколегії 21.05.13

УДК 517.929

О. А. Сивак, к.ф.-м.н.

Неперервні розв'язки лінійних функціонально-різницевих рівнянь та їх властивості

В даній роботі досліджується структура множини неперервних розв'язків систем лінійних функціонально-різницевих рівнянь. Запропоновано метод побудови загального неперервного розв'язку таких систем рівнянь.

Ключові слова: функціонально-різницеві рівняння.

Національний технічний університет України "КПІ"
03056 Київ, Україна, просп. Перемоги, 37

E-mail: olena_sivak@ukr.net

Статтю представив академік НАНУ, доктор фіз.-мат. наук, проф. Перестюк М. О.

1. Постановка задачі. Основи теорії лінійних різницевих і q -різницевих рівнянь вигляду

$$\begin{aligned}x(t+1) &= a(t)x(t), \\ x(qt) &= b(t)x(t),\end{aligned}$$

де всі елементи $a_{ij}(t)$, $i, j = 1, \dots, n$, матриці $a(t) = (a_{ij}(t))$ є аналітичними функціями в деякому околі точки $t = \infty$, були розроблені в працях Біркгофа і його учнів. Більше цього, в [1, 2] було побудовано представлення загального розв'язку таких систем рівнянь і досліджено його структуру. В подальшому ці системи розглядалися багатьма математиками (див. [3–5] і наведену в них літературу) і в даний час багато питань їх теорії достатньо добре вивчені при більш загальних припущеннях відносно матриці $a(t)$. У зв'язку з цим природно виникло ряд питань про одержання аналогічних результатів для систем лінійних рівнянь вигляду

$$x(t+1) = a(t)x(t) + b(t)x(qt), \quad (1)$$

де $t \in R = (-\infty, +\infty)$, $a(t), b(t)$ — деякі дійсні матриці розмірності $n \times n$ і q — деяка дійсна стала. Особливо важливим серед них є питання побудови загального неперервного розв'язку і дослідження його структури. Саме це питання і є основним об'єктом дослідження даної статті.

2. Основний результат.

Теорема 1. Нехай виконуються умови:

1) $1 < a_* \leq a(t) \leq a^* < +\infty$, $0 < q < 1$,

О. А. Syvak, Candidate of Physical and
Mathematical Sciences

The continuous solutions of linear of functional difference equations and their properties

The structure of the set of continuous solutions of systems of linear functional difference equations has been investigated. The method of construction of general continuous solution such of systems equations has been proposed.

Key Words: functional difference equations

The National Technical University of Ukraine "KPI"
03056 Kyiv, Ukraine, 37, Peremogy aven.

$$\begin{aligned}2) \Delta &= \frac{b}{a_* - a^*q} < 1, \\ \text{де } \sup_t |b(t)| &= b.\end{aligned}$$

Тоді рівняння (1) має сім'ю неперервних обмежених при $t \geq 0$ розв'язків, що залежить від довільної неперервної 1-періодичної функції $\omega(t)$.

Доведення. Покажемо, що функціонально-різницеве рівняння (1) має розв'язок у вигляді ряду

$$x(t) = \sum_{i=0}^{\infty} x_i(t), \quad (2)$$

де $x_i(t)$, $i = 0, 1, \dots$, — деякі неперервні функції. Дійсно, підставляючи (2) в (1), одержуємо

$$\sum_{i=0}^{\infty} x_i(t+1) = a(t) \sum_{i=0}^{\infty} x_i(t) + b(t) \sum_{i=0}^{\infty} x_i(qt).$$

Звідси безпосередньо випливає, що якщо функції $x_i(t)$, $i = 0, 1, \dots$, задовольняють послідовність рівнянь

$$x_0(t+1) = a(t)x_0(t), \quad (3_0)$$

$$x_i(t+1) = a(t)x_i(t) + b(t)x_{i-1}(qt), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (3_i)$$

то ряд (2) буде формальним розв'язком рівняння (1). Використовуючи представлення загального неперервного розв'язку рівняння (3₀) та умову 1, можна показати, що існує додатна стала M така, що при всіх $t \geq 0$ виконується оцінка

$$|x_0(t)| \leq Ma^{*t}. \quad (4_0)$$

Оскільки ряди

$$x_i(t) = - \sum_{j=0}^{\infty} \left[\prod_{p=0}^j a^{-1}(t+p) \right] \times \\ \times b(t+j) x_{i-1}(q(t+j)), \quad i = 1, 2, \dots \quad (4_i)$$

є формальними розв'язками відповідних рівнянь (3_i) , $i = 1, 2, \dots$, (в цьому можна переконатися безпосередньою підстановкою (4_i) , $i = 1, 2, \dots$, в (3_i) , $i = 1, 2, \dots$), то приймаючи до уваги (4_0) і умови 1, 2, покажемо, що ряди (4_i) , $i = 1, 2, \dots$, рівномірно збігаються до деяких неперервних функцій $x_i(t)$, $i = 1, 2, \dots$, для яких при всіх $i \geq 1$, $t \geq 0$ виконуються оцінки

$$|x_i(t)| \leq M \Delta^i a^{*qt}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (5)$$

Справді, враховуючи (4_0) , (4_1) , маємо

$$|x_1(t)| \leq \sum_{j=0}^{\infty} \left| \prod_{p=0}^j a^{-1}(t+p) \right| |b(t+j)| \times \\ \times |x_0(q(t+j))| \leq \sum_{j=0}^{\infty} a_*^{-(j+1)} b M a^{*q(t+j)} \leq \\ \leq M b a^{*qt} a_*^{-1} \sum_{j=0}^{\infty} (a_*^{-1} a^{*q})^j \leq M \frac{b}{a_* - a^{*q}} a^{*qt} = \\ = M \Delta a^{*qt},$$

тобто оцінка (5) має місце при $i = 1$. Розмірковуючи за індукцією, припустимо, що оцінка (5) доведена уже для деякого $i \geq 1$, і покажемо, що вона не зміниться при переході від i до $i+1$. Згідно (4_{i+1}) і (5) маємо

$$|x_{i+1}(t)| \leq \sum_{j=0}^{\infty} \left| \prod_{p=0}^j a^{-1}(t+p) \right| |b(t+j)| \times \\ \times |x_i(q(t+j))| \leq \sum_{j=0}^{\infty} a_*^{-(j+1)} b M \Delta^i a^{*q(q(t+j))} \leq \\ \leq M \Delta^i b a_*^{-1} a^{*q^2t} \sum_{j=0}^{\infty} (a_*^{-1} a^{*q^2})^j \leq \\ \leq M \Delta^i b a_*^{-1} a^{*qt} \sum_{j=0}^{\infty} (a_*^{-1} a^{*q})^j \leq \\ \leq M \Delta^i \frac{b}{a_* - a^{*q}} a^{*qt} = M \Delta^{i+1} a^{*qt}.$$

Отже, оцінка (5) виконується при всіх $i \geq 1$, $t \geq 0$. Звідси випливає, що ряди (4_i) , $i = 1, 2, \dots$, рівномірно збігаються при $t \geq 0$ до деяких неперервних вектор-функцій $x_i(t)$, $i = 1, 2, \dots$, для

яких має місце оцінка (5). В силу (5), ряд (2) рівномірно збігається при $t \geq 0$ до деякої неперервної функції $x(t)$, яка задовольняє умові

$$|x(t)| \leq \frac{M}{1 - \Delta},$$

і є розв'язком рівняння (1).

Розглянемо неоднорідне рівняння

$$y(t+1) = a(t)y(t) + b(t)y(qt) + f(t), \quad (6)$$

де $a(t), b(t), f(t) : R \rightarrow R$ та дослідимо структуру множини неперервних розв'язків при наступних умовах:

1) $1 < a_* \leq a(t) \leq a^* < +\infty$, $0 < q < 1$;

2) функції $b(t), f(t)$ є неперервними обмеженими при всіх $t \in R$ і такими, що $\sup_t |b(t)| = b$, $\sup_t |f(t)| = f$;

3) $\frac{b}{a_* - 1} = \theta < 1$.

Має місце наступна теорема.

Теорема 2. Якщо виконуються умови 1-3, то рівняння (6) має неперервний обмежений при $t \in R$ розв'язок $y(t)$ у вигляді ряду

$$y(t) = \sum_{i=0}^{\infty} y_i(t), \quad (7)$$

де $y_i(t)$, $i = 0, 1, \dots$, – деякі неперервні обмежені при $t \in R$ функції.

Доведення. Дійсно, підставляючи (7) в (6), отримуємо

$$\sum_{i=0}^{\infty} y_i(t+1) = a(t) \sum_{i=0}^{\infty} y_i(t) + b(t) \sum_{i=0}^{\infty} y_i(qt) + f(t).$$

Звідси безпосередньо випливає, що якщо функції $y_i(t)$, $i = 0, 1, \dots$, є розв'язками послідовності рівнянь

$$y_0(t+1) = a(t)y_0(t) + f(t), \quad (8_0)$$

$$y_i(t+1) = a(t)y_i(t) + b(t)y_{i-1}(qt), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (8_i)$$

то ряд (7) є формальним розв'язком рівняння (6).

Приймаючи до уваги умови теореми, можна переконатися, що ряд

$$y_0(t) = - \sum_{j=0}^{\infty} \left(\prod_{i=0}^j a^{-1}(t+i) \right) f(t+j) \quad (9_0)$$

рівномірно збігається при всіх $t \in R$, задовольняє рівняння (8_0) і виконується оцінка

$$|y_0(t)| \leq \frac{f}{a_* - 1} = f'. \quad (10_0)$$

Приймаючи до уваги (9₀), (10₀), можна послідовно показати, що ряди

$$y_i(t) = - \sum_{j=0}^{\infty} \left[\prod_{p=0}^j a^{-1}(t+p) \right] b(t+j) \times \\ \times y_{i-1}(q(t+j)), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (9_i)$$

рівномірно збігаються при всіх $t \in R$, задовольняють відповідні рівняння (8_{*i*}), $i = 1, 2, \dots$, і виконуються співвідношення

$$|\bar{y}_i(t)| \leq f' \theta^i, \quad i = 1, 2, \dots \quad (10_i)$$

Таким чином, оскільки функції $y_i(t)$, $i = 0, 1, \dots$, що визначаються за допомогою співвідношень (9_{*i*}), $i = 0, 1, \dots$, задовольняють умови (10_{*i*}), $i = 0, 1, \dots$, то ряд (7) рівномірно збігається до деякої неперервної функції $y(t)$, яка є розв'язком рівняння (6) і задовольняє при всіх $t \in R$ умові

$$|y(t)| \leq \frac{f'}{1-\theta}.$$

Теорему 2 доведено.

Дослідимо питання побудови загального розв'язку рівняння (1) при $t \leq 0$ та при виконанні наступних умов:

$$1) \quad 0 < a_* \leq a(t) \leq a^* < 1, \quad 0 < q < 1,$$

$$2) \quad \tilde{\Delta} = \frac{b}{a^{*q} - a^*} < 1,$$

де $\sup_t |b(t)| = b$.

Покажемо, що функціонально-різницева рівняння (1) має розв'язок у вигляді ряду (2). Підставляючи (2) в (1), одержуємо

$$\sum_{i=0}^{\infty} x_i(t+1) = a(t) \sum_{i=0}^{\infty} x_i(t) + b(t) \sum_{i=0}^{\infty} x_i(qt).$$

Звідси безпосередньо випливає, що якщо функції $x_i(t)$, $i = 0, 1, \dots$, задовольняють послідовності рівнянь

$$x_0(t+1) = a(t)x_0(t), \quad (11_0)$$

$$x_i(t+1) = a(t)x_i(t) + b(t)x_{i-1}(qt), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (11_i)$$

то ряд (2) буде формальним розв'язком рівняння (1). Використовуючи представлення загального неперервного розв'язку рівняння (11₀) та умову 1, можна показати, що існує додатна стала $\tilde{M}$ така, що при всіх $t \leq 0$ виконується оцінка

$$|x_0(t)| \leq \tilde{M} a^{*t}. \quad (12_0)$$

Оскільки ряди

$$x_i(t) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j(t) b(t-j) x_{i-1}(q(t-j)), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (12_i)$$

де $c_j(t) = \prod_{i=1}^{j-1} a(t-i)$, $c_1(t) = 1$ є формальними розв'язками відповідних рівнянь (11_{*i*}), $i = 1, 2, \dots$, (в цьому можна переконатися безпосередньою підстановкою (12_{*i*}), $i = 1, 2, \dots$, в (11_{*i*}), $i = 1, 2, \dots$), то приймаючи до уваги (12₀) і умови 1, 2, покажемо, що ряди (12_{*i*}), $i = 1, 2, \dots$, рівномірно збігаються до деяких неперервних функцій $x_i(t)$, $i = 1, 2, \dots$, для яких при всіх $i \geq 1$, $t \leq 0$ виконуються оцінки

$$|x_i(t)| \leq \tilde{M} \tilde{\Delta}^i a^{*qt}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (13)$$

Справді, враховуючи (12₀), (12₁), маємо

$$|x_1(t)| \leq \sum_{j=1}^{\infty} |c_j(t)| |b(t-j)| |x_0(q(t-j))| \leq \\ \leq \sum_{j=1}^{\infty} a^{*(j-1)} b \tilde{M} a^{*q(t-j)} \leq \tilde{M} b a^{*qt} a^{*-1} \times \\ \times \sum_{j=1}^{\infty} a^{*(1-q)j} \leq \tilde{M} \frac{b}{a^{*q} - a^*} a^{*qt} = \tilde{M} \tilde{\Delta} a^{*qt},$$

тобто оцінка (13) має місце при $i = 1$. Розмірковуючи за індукцією, припустимо, що оцінка (13) доведена уже для деякого $i \geq 1$, і покажемо, що вона не зміниться при переході від i до $i+1$. Згідно (12_{*i+1*}) і (13) маємо

$$|x_{i+1}(t)| \leq \sum_{j=1}^{\infty} |c_j(t)| |b(t-j)| |x_i(q(t-j))| \leq \\ \leq \sum_{j=1}^{\infty} a^{*(j-1)} b \tilde{M} \tilde{\Delta}^i a^{*q(q(t-j))} \leq \\ \leq \tilde{M} \tilde{\Delta}^i b a^{*-1} a^{*q^2 t} \sum_{j=1}^{\infty} a^{*(1-q^2)j} \leq \\ \leq \tilde{M} \tilde{\Delta}^i b a^{*-1} a^{*qt} \sum_{j=1}^{\infty} a^{*(1-q)j} \leq \\ \leq \tilde{M} \tilde{\Delta}^i \frac{b}{a^{*q} - a^*} a^{*qt} = \tilde{M} \tilde{\Delta}^{i+1} a^{*qt}.$$

Отже, оцінка (13) виконується при всіх $i \geq 1$, $t \leq 0$. Звідси випливає, що ряди (12_{*i*}), $i = 1, 2, \dots$, рівномірно збігаються при $t \leq 0$ до деяких неперервних вектор-функцій $x_i(t)$, $i = 1, 2, \dots$, для яких має місце оцінка (13). В силу (13), ряд (2) рівномірно збігається при $t \leq 0$ до деякої неперервної функції $x(t)$, яка задовольняє умові

$$|x(t)| \leq \frac{\widetilde{M}}{1 - \Delta},$$

і є розв'язком рівняння (1). Тим самим доведено наступна теорема.

Теорема 3. *Нехай виконуються умови 1,2. Тоді рівняння (1) має сім'ю неперервних обмежених при $t \leq 0$ розв'язків, що залежить від довільної неперервної 1-періодичної функції $\omega(t)$.*

Розглянемо неоднорідне рівняння

$$y(t+1) = a(t)y(t) + b(t)y(qt) + f(t), \quad (14)$$

де $a(t), b(t), f(t) : R \rightarrow R$ та дослідимо структуру множини неперервних розв'язків при наступних умовах:

- 1) $0 < a_* \leq a(t) \leq a^* < 1, 0 < q < 1$;
- 2) функції $b(t), f(t)$ є неперервними обмеженими при всіх $t \in R$ і такими, що $\sup_t |b(t)| = \widetilde{b}, \sup_t |f(t)| = \widetilde{f}$;
- 3) $\frac{\widetilde{b}}{1 - a^*} = \widetilde{\theta} < 1$.

Має місце наступна теорема.

Теорема 4. *Якщо виконуються умови 1-3, то рівняння (14) має неперервний обмежений при $t \in R$ розв'язок $y(t)$ у вигляді ряду*

$$y(t) = \sum_{i=0}^{\infty} y_i(t), \quad (15)$$

де $y_i(t), i = 0, 1, \dots$, — деякі неперервні обмежені при $t \in R$ функції.

Доведення. Дійсно, підставляючи (15) в (14), отримуємо

$$\sum_{i=0}^{\infty} y_i(t+1) = a(t) \sum_{i=0}^{\infty} y_i(t) + b(t) \sum_{i=0}^{\infty} y_i(qt) + f(t).$$

Звідси безпосередньо випливає, що якщо функції $y_i(t), i = 0, 1, \dots$, є розв'язками послідовності рівнянь

$$y_0(t+1) = a(t)y_0(t) + f(t), \quad (16_0)$$

$$y_i(t+1) = a(t)y_i(t) + b(t)y_{i-1}(qt), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (16_i)$$

то ряд (15) є формальним розв'язком рівняння (14).

Приймаючи до уваги умови теореми, можна переконатися, що ряд

$$y_0(t) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j(t)f(t-j), \quad (17_0)$$

де $c_j(t) = \prod_{i=1}^{j-1} a(t-i), c_1(t) = 1$ рівномірно збігається при всіх $t \in R$, задовольняє рівняння

(16₀) і виконується оцінка

$$|y_0(t)| \leq \frac{\widetilde{f}}{1 - a^*} = f'. \quad (18_0)$$

Приймаючи до уваги (17₀), (18₀), можна послідовно показати, що ряди

$$y_i(t) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j(t) b(t-j) y_{i-1}(q(t-j)), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (17_i)$$

рівномірно збігаються при всіх $t \in R$, задовольняють відповідні рівняння (16_i), $i = 1, 2, \dots$, і виконуються співвідношення

$$|y_i(t)| \leq f' \widetilde{\theta}^i, \quad i = 1, 2, \dots \quad (18_i)$$

Таким чином, оскільки функції $y_i(t), i = 0, 1, \dots$, що визначаються за допомогою співвідношень (17_i), $i = 0, 1, \dots$, задовольняють умови (18_i), $i = 0, 1, \dots$, то ряд (15) рівномірно збігається до деякої неперервної функції $y(t)$, яка є розв'язком рівняння (14) і задовольняє при всіх $t \in R$ умові

$$|y(t)| \leq \frac{f'}{1 - \widetilde{\theta}}.$$

Теорему 4 доведено.

Список використаних джерел

1. Birkhoff G.D. General theory of linear difference equations.— Trans. Amer. Math. Soc., 1911, 12, pp. 243 – 284.
2. Mitropolsky Y. A., Samoilenko A. M., Martynyuk D.I. Systems of Evolution Equations with Periodic and Quasiperiodic Coefficients.— Kiev:Naukova Dumka, 1985. — 216 P.
3. Pelyukh G. P. On the theory of systems of linear difference equations with continuous argument // Doklady Akademii Nauk — 2006, vol. 407, No. 5. — pp. 600 – 603.
4. Pelyukh G.P. About the structure of the general of continuous solution of systems of linear difference equations with continuous argument // Reports of the National Academy of Science of Ukraine. — 2007, No. 1. — pp. 29 — 33.
5. Pelyukh G.P., Syvak O.A. About of the structure of the set of continuous solutions of functional difference equations with linearly reformed argument // Nonlinear Oscillations. — 2010, vol. 13, No. 1. — pp. 75 — 95.

Надійшла до редколегії 24.10.2013

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 519.8

Антосяк П.П., к.ф.-м.н.

Про одне узагальнення слабого принципу Кондорсе

Для задачі колективного вибору в постановці К.Ерроу запропоновано узагальнення слабого принципу Кондорсе. Вивчено питання обґрунтованості за цим принципом деяких відомих правил колективного вибору.

Ключові слова: прийняття рішень, принцип Кондорсе, правила колективного вибору.

¹Ужгородський національний університет, 88000, м. Ужгород, вул. Університетська, 14 e-mail: antosp@ukr.net

Статтю представив д.т.н, проф. Волошин О.Ф.

Introduction. One of the topical issues in the field of collective decision making is a problem of optimality principle definition – the principle of alternatives comparing, in the result of which a decision in favor of one or another alternative is made. On the set of the two alternatives the only possible and correct principle of optimality is a choice according to relative majority rule [1]. However, it is known [2] that on the set of three or more alternatives arises a problem of constructing the rule of collective choice, which would be adequate continuation of collective choice according to majority principle of pairs of alternatives.

To date the principle proposed in the late XVIII century by French philosopher and mathematician Condorcet one way or another is taken into consideration in all rational models of collective decision making [1-2]. The rules that satisfy this principle are called reasonably (wealthy) Condorcet. The above said makes actual the generalization problem of the concept of Condorcet reasonability.

In this paper we propose one generalization of the weak version of Condorcet's principle.

Statement of the problem and the basic concepts. Let a finite set of alternatives be $A = \{a_1, \dots, a_{n_A}\}$ (n_A – number of alternatives), and also a set (profile) $\Pi = \{P_1, \dots, P_{n_E}\}$ of estimations of alternatives set A , where P_l is strict linear order on a set A , given by individual l of collective (group) and which corresponds to their individual preferences on a set of alternatives A

P.P. Antosyak, Candidate of Physics and Mathematics Sciences

About one generalization of weak Condorcet's principle

One generalization of weak Condorcet's principle was proposed for the problem of collective choice in the formulation of Arrow. The question of consistency of some well-known rules of collective choice was explored according to this principle.

Key Words decision making, Condorcet's principle, the rules of group choice.

¹Uzhgorod National University, 88000, Uzhgorod, Universitetska str., 14, e-mail: antosp@ukr.net

($l \in N_E = \{1, \dots, n_E\}$, n_E – quantity of individuals). The problem of collective (group, resulting, etc.) order definition which in the “best” possible way displays the preferences on set A of group of individuals in general is set.

The only possible and correct solution on the set of the two alternatives is a collective choice according to the relative majority rule: the best alternative is that one which was given a strong preference for at least half of individuals. On the set of three or more alternatives arises a problem of constructing of collective choice rule, which would be adequate continuation of voting according to majority principle for a couple of alternatives.

Definition 1. Let's denote for any profile of individual $c_{ij} = \text{Card}(\{l \in N_E : (a_i, a_j) \in P_l\})$, $\forall i, j \in N_A = \{1, \dots, n_A\}$. Value c_{ij} – is the number of individuals which gave strong preference to alternative a_i over alternative a_j in corresponding profile.

Definition 2. For any profile of individual preferences value $m_{ij} = c_{ij} - c_{ji}$ is called majority margin of alternatives a_i over alternative a_j , $\forall i, j \in N_A$, and matrix $M = (m_{ij})_{i,j=1,\dots,n_A}$ is called matrix of majority margin.

In the further if you need to point out correspondence of mentioned notations to certain profile $\Pi \in P$ (P – set of all possible profiles), then we will write down $c_{ij}(\Pi)$, $m_{ij}(\Pi)$ and $M(\Pi)$.

Definition 3. Relation of simple majority (majority relation), which was generated by profile $\Pi \in \mathbf{P}$, is called connected binary relation $R_{M(\Pi)}$ on a set A , which is defined as following

$$(a_i, a_j) \in R_{M(\Pi)} \Leftrightarrow m_{ij}(\Pi) \geq 0, \quad \forall a_i, a_j \in A.$$

Definition 4. The tournament is called a pair (A, T) , where T is asymmetric and connected binary relation on a set of alternatives A .

Definition 5. Let q – is non-negative real number. q -weighted tournament is called a pair (A, G) , where G – is matrix, $G = (g(a_i, a_j))_{i,j=1,\dots,n_A}$, is such, that $g(a_i, a_j) + g(a_j, a_i) = q$, $\forall a_i, a_j \in A$ and $g(a_i, a_j) \neq g(a_j, a_i)$, for different alternatives $i, j \in N_A$. From definition 5 it follows that $g(a_i, a_i) = q/2$, $\forall a_i \in A$.

Every q -weighted tournament (A, G) generates tournament (A, T_G) in the following way: $(a_i, a_j) \in T_G \Leftrightarrow m(a_i, a_j) > m(a_j, a_i)$, $\forall a_i, a_j \in A$.

Every q -weighted tournament (A, G) generates 0-weighted tournament (A, G_0) , elements of matrix G_0 of which are determined in the following way: $g_0(a_i, a_j) = g(a_i, a_j) - g(a_j, a_i) = 2g(a_i, a_j) - q$, $\forall a_i, a_j \in A$.

It is easy to see if the number of individuals n_E is odd, then arbitrary profile of individual preferences $\Pi \in \mathbf{P}$ generates n_E -weighted tournament (A, G) , where $g(a_i, a_j) = c_{ij}$, $\forall i \neq j$. In general case when a number of individuals is even such statement is not always true. In case when profile $\Pi \in \mathbf{P}$ generates n_E -weighted tournament (A, G) , then it generates 0-weighted tournament (A, G_0) , where $G_0 = M(\Pi)$ and $T_G = R_M$. Taking into consideration all said above we choose on a $\mathbf{P}$ subset $\mathbf{T} \subset \mathbf{P}$ of profiles which generate 0-weighted tournament.

Smith's principle [2]. A set of profiles $\mathbf{T}$ is considered. Let there exists some non-empty set W_{Smith} which is such that:

1. $W_{Smith} \subset A$;
2. $\forall a \in W_{Smith}, \forall b \in A \setminus W_{Smith} \Rightarrow (a, b) \in R_M$.

The winner shall be chosen from the set W_{Smith} .

Analogue of Smith's principle. A set of profiles $\mathbf{P} \setminus \mathbf{T}$ is considered. Let there exists non-empty set W_C which is such, that:

1. $W_C \subset A$;
2. $\forall a \in W_C \Rightarrow \neg \exists b \in A \setminus W_C : (b, a) \in R_M^s, R_M^s -$ is strict component of majority relation;
3. $\neg \exists b \in A \setminus W_C : W_C \cup \{b\}$ satisfies 1 and 2.

The winner shall be chosen from the set W_C .

It is easy to see that for each profile $\Pi \in \mathbf{P} \setminus \mathbf{T}$, set W_C contains all weak winners according to Condorcet (alternative is a weak winner according to Condorcet, if there is no other alternative, which would win from it according to the rule of relative majority) for this profile.

Kemeny rule. Let $R_1, R_2 \in \Omega$ (Ω – set of all connected, asymmetric, transitive binary relations) are two arbitrary strict linear orders. Let's define the distance between these two relations as the distance between the sets:

$$\delta(R_1, R_2) = \frac{\text{Card}((R_1 \setminus R_2) \cup (R_2 \setminus R_1))}{2}.$$

Binary relation R_{Kemeny} is called collective order of Kemeny (Kemeny's median) if and only if

$$R_{Kemeny} = \arg \min_{R \in \Omega} \sum_{i=1}^{n_E} \delta(R, P_i).$$

Slater's rule is to find collective orders, which are closest to the corresponding relation of simple majority. Let R_M be relation of simple majority generated by some profile. Binary relation R_{Slater} is called Slater's collective order if and only if

$$R_{Slater} = \arg \min_{R \in \Omega} \delta(R, R_M).$$

Prudent order. Suppose $\lambda \in \{-n_E, -n_E + 2, \dots, n_E - 2, n_E\}$ and let's define relation $R_{>\lambda}$: $(a_i, a_j) \in R_{>\lambda} \Leftrightarrow m_{ij} > \lambda$, $\forall i, j \in N_A, i \neq j$. Prudent order is called strict linear order R_{PO} , which completes acyclic relation $R_{>\beta}$, that is $R_{>\beta} \subseteq R_{PO}$,

$$\beta = \min\{\lambda \in \{-n_E, -n_E + 2, \dots, n_E - 2, n_E\} :$$

$$R_{>\lambda} - \text{acyclic}\}.$$

Theorem 1. Kemeny's rule satisfies an analogue of Smith's principle. Slater's rule and prudent order satisfy the Smith's principle and its analogue.

Proof. Truth of statement concerning the rules of Kemeny and Slater follows from their equivalence to linear ordering problem of alternatives [4], and as a result from decomposition procedures for a linear ordering of alternatives. [5]

Let's choose arbitrary alternatives $a_i \in W_C$, $a_j \in A \setminus W_C$. Let $m_{ij} > \beta$. Then for every prudent

order is performed $(a_i, a_j) \in R_{>\beta}$, and from asymmetry of acyclic relation it follows that $(a_j, a_i) \notin R_{>\beta}$. If $m_{ij} \leq \beta$, then from $(a_i, a_j) \in R_M$ and $m_{ij} = -m_{ji}$ it follows $m_{ji} \leq 0 \leq m_{ij} \leq \beta$, this is because $(a_i, a_j) \notin R_{>\beta}$ and $(a_j, a_i) \notin R_{>\beta}$. In this case a strict partial order $R_{>\beta}$ can be always completed to a strict linear order $R_{>}$, so that $(a_i, a_j) \in R_{>}$, which makes it impossible to choose any alternative from the set $A \setminus W_C$. Similarly we can show also another part of the theorem.

Egalitarian Simpson's rule. To win according to this rule it is necessary that alternative does not collect against it a large majority according to this rule. Simpson's score of alternative $a_i \in A$ is called value $S(a_i) = \min_{z \in N_i^-} m_{iz}$.

Simpson's collective order is called ordering $R_{Simpson}$, which is defined as follows:

$$(a_i, a_j) \in R_{Simpson} \Leftrightarrow S(a_i) \geq S(a_j), \quad \forall a_i, a_j \in A.$$

Utilitarian Tideman's rule. As alternative to the rule (1) it is possible to define the rule which is based on an utilitarian criterion. Utilitarian score of alternative $a_i \in A$ is called value $U(a_i) = \sum_{z \in N_i^-} m_{iz}$.

Utilitarian collective order is called ordering R_{UC} , which is defined as follows:

$$(a_i, a_j) \in R_{UC} \Leftrightarrow U(a_i) \geq U(a_j), \quad \forall a_i, a_j \in A.$$

Copland's rule. In order to defeat Copland's rule it is necessary to win on the basis of simple majority from the greatest number of other alternatives. Copland's score of alternative $a_i \in A$ is called value

$$C(a_i) = 2Card(\{z \in N_A \setminus \{i\} : w_{iz} > 0\}) + Card(\{z \in N_A \setminus \{i\} : w_{iz} = 0\}).$$

Copland's collective rule is called ordering $R_{Copland}$, which is defined as follows:

$$(a_i, a_j) \in R_{Copland} \Leftrightarrow C(a_i) \geq C(a_j), \quad \forall a_i, a_j \in A.$$

Borda's rule puts in order alternatives according to the sum of the ranks of alternatives in a profile of individual preferences. We use equivalent method of points calculation which is based on the majority margin. Borda's score of alternative $a_i \in A$ is called value $B(a_i) = \sum_{z=1}^{n_A} w_{iz}$. Borda's collective order is called ordering R_{Borda} , which is defined as follows:

$$(a_i, a_j) \in R_{Borda} \Leftrightarrow B(a_i) \geq B(a_j), \quad \forall a_i, a_j \in A.$$

Theorem 2. If a strong winner according to Condorcet is absent the Smith's principle is violated at the determination of collective order according to the rules of Simpson and Tiedemann, if $n_A \geq 4$; to Borda's rule if $n_A \geq 5$. On the set of 4 alternatives if a strong winner according to Condorcet is absent Borda's rule satisfies Smith's principle.

Proof. Let matrix M of majority margin:

$$|m_{ij}| > x \geq 1, 1 \leq i < j \leq n_A - 1, m_{in_A} = x, 1 \leq i \leq n_A - 1.$$

It is easy to see for a profile which generates matrix M , an inclusion $W_{Smith} \subseteq A \setminus \{a_{n_A}\}$ is performed. We also have the following Simpson's score: $S(a_{n_A}) = -x$, and for alternative from the set $A \setminus \{a_{n_A}\}$, due to the fact that there is no strong winner according to Condorcet $S(a_i) < -x$, $1 \leq i \leq n_A - 1$ is performed.

Let

$$\begin{aligned} m_{12} = u, m_{13} = -v, m_{23} = g, m_{14} = x, m_{24} = y, m_{34} = z, \\ u > 0, v > 0, g > 0, x > 0, y > 0, z > 0, \\ u > x + y + z, v > x + y + z, g > x + y + z, \\ m_{1j} > 0, m_{2j} > 0, m_{3j} > 0, 4 < j \leq n_A, \\ m_{ij} > 0, 4 \leq i < j \leq n_A. \end{aligned}$$

For a profile which defines the above showed matrix of majority margin we have $W_{Smith} = \{a_1, a_2, a_3\}$ and the following utilitarian estimations are true: $UC(a_1) = -v$, $UC(a_2) = -u$, $UC(a_3) = -g$, $UC(a_4) = -x - y - z$, which taking into consideration introduced restrictions makes it impossible to choose any alternative from the set W_{Smith} according to utilitarian criterion.

Let's define the matrix of majority margin according to the following rule:

$$\begin{aligned} m_{12} = m_{23} = u, m_{13} = -u, m_{45} = v, v > 5u, u > 0, \\ m_{14} = m_{15} = m_{24} = m_{25} = m_{34} = m_{35} = u, \\ m_{1j} = m_{2j} = m_{3j} = m_{4j} = x, x > 0, 5 < j \leq n_A, \\ m_{ij} > 0, 5 < i < j \leq n_A. \end{aligned}$$

Let's consider the following profile which generates such matrix. We have $W_{Smith} = \{a_1, a_2, a_3\}$ and the following Borda's scores are true:

$$\begin{aligned} B(a_1) = B(a_2) = B(a_3) = 2u + (n_A - 5)x, \\ B(a_4) = -3u + v + (n_A - 5)x. \end{aligned}$$

Then taking into consideration the restrictions on the elements value of majority margin matrix the following scores are performed

$B(a_4) - B(a_i) = -5u + v > 0$, $i = 1, 2, 3$, which makes impossible the choice of any alternative of the set W_{Smith} according to Borda's rule.

Matrix of majority margin M of arbitrary profile of individual preferences on the set of four alternatives, for which $Card(W_{Smith}) = 3$, with some renumbering of alternatives satisfies the following restrictions:

$$w_{12} = u, w_{13} = -v, w_{23} = g, \\ u > 0, v > 0, g > 0, w_{i4} > 0, i = 1, 2, 3.$$

For such matrix we have $B(a_4) < 0$, $B(a_1) = u - v$, $B(a_2) = -u + g$, $B(a_3) = v - g$. If suppose that $B(a_i) < 0$, $\forall i \in \{1, 2, 3\}$, then from the corresponding Borda's scores we get contradiction in the form of inequality $u < v < g < u$. So is found $i \in \{1, 2, 3\}$, for which $B(a_i) \geq 0$, which makes impossible the choice of alternative a_4 according to Borda's rule. Theorem is proved.

Top cycle. Let (A, T) – is tournament. Let us denote by T^* transitive closure T . Top cycle of tournament (A, T) is called non-empty subset of top elements for relation T^* . Let us denote $TC(T) = \{a \in A : (a, b) \in T^*, \forall b \in A \setminus \{a\}\}$.

Uncovered set. Let (A, T) – is tournament. Let us define for relation T the relation of covering $R_{covering}$: $(b, a) \in R_{covering} \Leftrightarrow a \neq b, (b, a) \in T \wedge \forall c \in A : (a, c) \in T \Rightarrow (b, c) \in T$.

Uncovered set $US(T)$ of tournament (A, T) is called non-empty subset of top elements of covering relation $R_{covering}$:

$$US(T) = \{a \in A : \neg \exists b \in A : (b, a) \in R_{covering}\}$$

Minimal covering set. Covering set of tournament (A, T) is called subset $B \subset A$, which satisfies the following condition:

$$US(A, T | B) = B \text{ u } \forall b \notin B : b \notin US(A, T | B \cup \{b\}),$$

where $T | B$ are those and only those pairs T , the elements of which belong to B . Minimal covering set $MC(T)$ of tournament (A, T) is called a single covered set of this tournament, which does not contain any other covering set.

Bipartisan set. Tournament game, which is generated by tournament (A, T) is called symmetric (A, A, u_T) of two persons with zero-sum with gain

$$u_T(a, b) = \begin{cases} 1, & \text{if } (a, b) \in T; \\ -1, & \text{if } (b, a) \in T; \\ 0, & \text{if } a = b. \end{cases}$$

Set $BS(T)$ of tournament (A, T) is called a single Nash equilibrium in mixed strategies of game (A, A, u_T) , which is generated by this tournament.

The approach of [3-4] consists in the use of rules of choice, which would provide the choice from the sets $TC(T_M)$, $US(T_M)$, $MC(T_M)$, $BS(T_M)$ respectively, where T_M is tournament, generated by majority relation R_M .

Let us denote by W_{Kemeny} , $W_{Copeland}$, $W_{Simpson}$, W_{UC} , W_{Borda} a set of minimal elements of respective collective orders obtained according to existing rules. It is known [2], that for every tournament (A, T) we have the following:

- $BP(T) \subseteq MC(T) \subseteq US(T) \subseteq TC(T)$;
- if $W_{Smith} \neq \emptyset$, then $TC(T) \subseteq W_{Smith}$;
- $W_{Copeland} \subseteq US(T)$;
- $W_{Kemeny} \subseteq TC(T)$.

From theorem 2 we get.

Conclusion 1. If $n_A \geq 4$, then there exists a profile $\Pi \in T$, for which does not exist a strong winner according to Condorcet and

$$TC(R_{M(\Pi)}) \cap W_{Simpson}(\Pi) = US(R_{M(\Pi)}) \cap W_{Simpson}(\Pi) = \emptyset, \\ MC(R_{M(\Pi)}) \cap W_{Simpson}(\Pi) = BS(R_{M(\Pi)}) \cap W_{Simpson}(\Pi) = \emptyset.$$

Conclusion 2. If $n_A \geq 4$, then there exists profile $\Pi \in T$, for which does not exist a strong winner according to Condorcet and

$$TC(R_{M(\Pi)}) \cap W_{UC}(\Pi) = US(R_{M(\Pi)}) \cap W_{UC}(\Pi) = \emptyset, \\ MC(R_{M(\Pi)}) \cap W_{UC}(\Pi) = BS(R_{M(\Pi)}) \cap W_{UC}(\Pi) = \emptyset.$$

Conclusion 3. If $n_A \geq 5$, then there exists a profile $\Pi \in T$, fir which does not exist a strong winner according to Condorcet and

$$TC(R_{M(\Pi)}) \cap W_{Borda}(\Pi) = US(R_{M(\Pi)}) \cap W_{Borda}(\Pi) = \emptyset, \\ MC(R_{M(\Pi)}) \cap W_{Borda}(\Pi) = BS(R_{M(\Pi)}) \cap W_{Borda}(\Pi) = \emptyset.$$

Theorem 3. If the weak winners according to Condorcet are absent the analogue of Smith's principle is violated at the determination of collective order according to Copland's rule, if $n_A \geq 8$; according to Simpson's and Tideman's rules if $n_A \geq 4$; according to Borda's rule if $n_A \geq 6$.

Proof. Let us define the following matrix of majority margin:

$$\begin{aligned} m_{12} > 0, m_{23} > 0, m_{34} > 0, m_{13} < 0, m_{14} = 0, m_{24} = 0, \\ m_{ii+1} < 0, i = 4, 5, \dots, n_A - 1, \\ m_{ij} \geq 0, 4 \leq i \leq n_A - 2, i + 2 \leq j \leq n_A, \\ m_{ij} = 0, 1 \leq i \leq 3, 5 \leq j \leq n_A. \end{aligned}$$

For the corresponding profile which generates the considered matrix of majority margin is valid: $W_C = \{a_1, a_2, a_3\}$, $C(a_3) = 2 \cdot 2 + n_A - 4 = n_A$, $C(a_5) = 3 + 2(n_A - 5) = 2n_A - 7$. Hence taking into consideration the restrictions on the number of alternatives we obtain score $C(a_5) - C(a_3) = 2n_A - 7 - n_A = n_A - 7 > 0$, which makes it impossible to choose any alternative from W_C according to Copland's rule.

Let the following matrix of majority margin:

$$|m_{ij}| > x \geq 0, 1 \leq i < j \leq n_A - 1, x > m_{in_A} \geq 0, 1 \leq i \leq n_A - 1.$$

For a profile which corresponds to this matrix the following inclusion is performed $W_C \subseteq A \setminus \{a_{n_A}\}$ and, taking into consideration weak winners according to Condorcet the following inequalities are performed $S(a_i) < -x < S(a_{n_A})$, $1 \leq i \leq n_A - 1$, which makes it impossible to choose any alternative from set W_C according to Simpson's rule.

For the next part of the statement we define the following matrix M :

$$\begin{aligned} m_{12} = u, m_{13} = -v, m_{23} = g, \\ m_{14} = x, m_{24} = y, m_{34} = 0, m_{45} = -z, \\ u > 0, v > 0, g > 0, x > 0, y > 0, z > 0, \\ u > x + y + z, v > x + y + z, g > x + y + z, \\ m_{1j} > 0, m_{2j} > 0, m_{3j} > 0, 4 < j \leq n_A, \\ m_{ii+1} < 0, i = 5, \dots, n_A - 1, \end{aligned}$$

References

1. Voloshyn O.F., Maschenko S.O. Models and methods of decision making. – K.: VPC "Kyiv university", 2010. – 336 p. (in Ukrainian)
2. Mulen E. Cooperative decision making. – M.: Mir, 1991. – 464 p. (in Russian)
3. P.P. Antosyak. Generalization of median approach is in case of fuzzy individual preferences // Bulletin of Kyiv University. Series: Physical and Mathematical Sciences. – 2010. – № 2. – P. 81-86.

$$m_{ij} > 0, i = 4, \dots, n_A - 2, j = i + 2, \dots, n_A.$$

Then by analogy with the corresponding case of the previous theorem and taking into consideration the introduced restrictions, we obtain inability to choose any of the alternatives of a set W_C according to utilitarian criterion.

For part of the statement, which refers to the negative result concerning the Borda's rule we consider the profile, which leads to the following matrix of majority margin:

$$\begin{aligned} m_{12} = m_{23} = u > 0, m_{13} = -u, m_{in_A} = x > 0, i = 1, 2, 3, 4 \\ m_{ij} = 0, i = 1, 2, 3, 3 < j < n_A, m_{4j} = 0, 5 < j < n_A - 1, \\ m_{ii+1} = -y, y > 5x, 3 < i \leq n_A - 1, \\ m_{ij} = 0, 3 < i \leq n_A - 2, i + 2 \leq j \leq n_A. \end{aligned}$$

For such profile $W_C = \{a_1, a_2, a_3\}$ we have:

$B(a_1) = B(a_2) = B(a_3) = x$, $B(a_{n_A}) = -4x + y$. Then taking into consideration the restrictions on the value of elements of majority margin matrix such scores are true $B(a_{n_A}) - B(a_i) = -4x + y - x > 0$, $i = 1, 2, 3$, which makes it impossible to choose any alternative from a set W_C according to Bordas' rule.

Conclusions. A generalization for one principle of rational collective choice is suggested for a problem of collective choice in the classical formulation in this paper. If there is a weak winner according to Condorcet for some profile of individual preferences then the proposed principle coincides with Condorcet's principle, and in the absence thereof – serve as its reasonable substitution (continuation). Study of consistency according to this principle of some well-known rules of collective choice proves once again the complexity and paradox of the theory of collective decision making.

Надійшла до редколегії 15.07.2013

УДК 517.929.4

A.V.Shatyrko¹, PhD in Math., Docent

On stabilization of neutral type nonlinear indirect scalar processes

By employing the direct Lyapunov method, using Lyapunov-Krasovskii functional approach, stabilization problem of nonlinear scalar Lurie-type indirect control systems of neutral type is considered. Conditions are constructed in terms of matrix algebraic inequalities.

Key Words: Lyapunov's functional, absolute stability, neutral type time-delay, stabilization.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova av., 4d
E-mail: a_shatyrko@mail.ru

Шатирко А.В.¹, к.ф.-м.н., доц.

Стабілізація скалярних процесів непрямого регулювання нейтрального типу

На основі прямого методу Ляпунова, з використанням функціоналу Ляпунова-Красовського, розглянуто задачу стабілізації до стану абсолютної стійкості нелінійних скалярних процесів непрямого регулювання нейтрального типу. Результати сформульовано у вигляді матричних алгебраїчних нерівностей..

Ключові слова: функціонал Ляпунова, абсолютна стійкість, відхилення аргументу нейтрального типу, стабілізація

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, Київ, пр-т Глушкова 4д
E-mail: a_shatyrko@mail.ru

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Хусаїнов Д.Я.

1 Introduction

One of the problems of stability motion is the problem of absolute stability. It arise in solving practical tasks. In some technical control systems, the control function is the nonlinear function of one variable located between two lines in the first and third quarters of the coordinate plane. Originally, the control systems of ordinary differential equation were considered [1-5].

Time-delay naturally appears in many real control processes, and it is frequently a source of instability. But the systems with deviating arguments better describe the real systems. In recent years, the absolute stability problem of nonlinear control systems with aftereffect is a topic of great practical importance which has attracted a lot of interests [3-7]. Some neutral type nonlinear systems with indirect regulation are considered in [6-10]. The sufficient conditions of absolute stability are derived in the papers [8-10] by direct Lypunov method with using Lyapunov-Krasovskii functionals in the type of the sum of

the quadratic form from current coordinates plus the integral from delay coordinates and the integral of nonlinear components of the considered system. And the coefficients of the exponential decay of solutions are calculated. All results [7-10] has unified form of matrix algebraic inequalities.

But reasonable question has arise. What we will do in case if there is no any positive answer on absolute stability of investigated systems, using all previous results. There are two traditional next steps:

we need to change method of investigation (radical decision) – for example we will use Popov-Yakubovich frequency method [11,12];

we need to change Lyapunov function or functional.

But there is other new interesting way: we can try to introduce new linear control and to stabilize close-loop system at previous chosen Lyapunov function or functional. There are some interesting papers devoted to investigation of stability and stabilization tasks in this rezone [12-17].

Present article is direct extension of [14-16]. Using the techniques of paper [17], the regulatory processes that can be described by scalar equation of neutral type was considered. It is believed that the solution is not absolutely stable, or could not find the correct parameters of Lyapunov-Krasovskii functional to establish this fact. We gives the solution to the stabilization problem to absolute stability state in the selected class of Lyapunov-Krasovskii functionals, by introducing feedback for phase coordinates, taken in the present and previous points in time.

2 Problems formulation and main results

Main goal of this article is consider a n -dimensional regulation process x described by the system of $n+1$ equations,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[x(t) - Dx(t - \tau)] &= Ax(t) + Bx(t - \tau) + bf(\sigma(t)) \\ \frac{d}{dt}\sigma(t) &= c^T x(t) - \rho\sigma(t), \end{aligned}$$

where $t \geq t_0 \geq 0$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ is the n -dimensional column vector of the state, σ is the scalar function of the control defined on $[t_0, \infty)$, A , B and D are $n \times n$ -constant matrices, $|D| < 1$, $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T$ is an n -dimensional constant column vector, $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)$ is an n -dimensional constant row vector, $\tau > 0$ and $\rho > 0$ are constants, $f(\sigma)$ is continuous function on $\mathfrak{R}$ satisfying so-called linear sector condition.

But for the results visibility, all next investigation will present for one-dimensional case. And its generalization is not so difficult to do by himself.

Therefore, let us consider an indirect control process described by a system of two scalar equations with delay argument of neutral type in the form

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[x(t) - dx(t - \tau)] &= a_1 x(t) + a_2 x(t - \tau) + bf(\sigma(t)) \\ \frac{d}{dt}\sigma(t) &= cx(t) - \rho f\sigma(t), \end{aligned} \quad (1)$$

where $t \geq t_0 \geq 0$, x is the state function, σ is the control defined on $[t_0, \infty)$, a_1 , a_2 , b , c , d ,

$\rho > 0$, $\tau > 0$ are constants, $|d| < 1$, $f(\sigma)$ is continuous nonlinear function on $\mathfrak{R}$ satisfying sector condition

$$k_1 \sigma^2 \leq f(\sigma)\sigma \leq k_2 \sigma^2, \quad (2)$$

where $k_2, k_1 - \text{const} : k_2 > k_1 > 0$.

Definition 1 The continuous vector function $(x, \sigma) : [t_0 - \tau, \infty) \rightarrow \mathfrak{R}^2$ is said to be a solution of (1) on $[t_0, \infty)$ if (x, σ) is continuously differentiable on $[t_0, \infty)$ and satisfies the system (1) on $[t_0, \infty)$.

Definition 2 The system (1) is called absolutely stable if the trivial solution $(x, \sigma) = (0, 0)$ of the system (1) is globally asymptotically stable for an arbitrary function $f(\sigma)$ satisfying (2).

For this case Lyapunov-Krasovskii functional, which was used for investigation in papers [8-10], will present in next form

$$\begin{aligned} V[x(t), \sigma(t), t] &= hx^2(t) + \beta \int_0^{\sigma(t)} f(\sigma) d\sigma + \\ &+ \int_{t-\tau}^t e^{-\varsigma(t-s)} \{g_1 x^2(s) + g_2 \dot{x}^2(s)\} ds \end{aligned} \quad (3)$$

where $h > 0$, $g_1 > 0$, $g_2 > 0$, $\beta > 0$, $\varsigma > 0$ are constants, (x, σ) is a solution of (1), and $t \geq t_0 \geq 0$. Define, using the coefficients of the functional (3), auxiliary numbers

$$s_{11}^1 = -2a_1 h - g_1 - a_1^2 g_2, \quad s_{12}^1 = -ha_2 - a_1 a_2 g_2,$$

$$s_{13}^1 = -hd - a_1 d g_2, \quad s_{14}^1 = -hb - a_1 g_2 b - \frac{1}{2} \beta c,$$

$$s_{22}^1 = e^{-\varsigma\tau} g_1 - a_2^2 g_2, \quad s_{23}^1 = -a_1 a_2 g_2,$$

$$s_{24}^1 = -a_2 g_1 b,$$

$$s_{33}^1 = e^{-\varsigma\tau} g_2 - d^2 g_2, \quad s_{34}^1 = -d g_2 b,$$

$$s_{44}^1 = -b^2 g_2 - \beta \rho$$

and the matrix

$$S_1[h, g_1, g_2, \beta, \varsigma] =$$

$$= \begin{bmatrix} s_{11}^1 & s_{12}^1 & s_{13}^1 & s_{14}^1 \\ s_{12}^1 & s_{22}^1 & s_{23}^1 & s_{24}^1 \\ s_{13}^1 & s_{23}^1 & s_{33}^1 & s_{34}^1 \\ s_{14}^1 & s_{24}^1 & s_{34}^1 & s_{44}^1 \end{bmatrix}.$$

Our first result is the theorem on absolute stability for the considered system (1).

Theorem 1 Suppose that there exist constants

$$h > 0, g_1 > 0, g_2 > 0, \beta > 0, \varsigma > 0,$$

such that the matrix $S_1[h, g_1, g_2, \beta, \varsigma]$ is positive definite. Then the system (1) is absolutely stable.

Proof of this theorem follows directly from the corresponding Theorem 1 [8-10].

As follows from the Sylvester criterion [15,16] the necessary and sufficient condition for positive definite of the matrix $S_1[h, g_1, g_2, \beta, \varsigma]$ is its main diagonal elements positivity, i.e.

$$\Delta_1^1 = s_{11}^1 > 0, \quad (4)$$

$$\Delta_2^1 = s_{11}^1 s_{22}^1 - (s_{12}^1)^2 > 0, \quad (5)$$

$$\Delta_3^1 = \begin{vmatrix} s_{11}^1 & s_{12}^1 & s_{13}^1 \\ s_{12}^1 & s_{22}^1 & s_{23}^1 \\ s_{13}^1 & s_{23}^1 & s_{33}^1 \end{vmatrix} > 0, \quad (6)$$

$$\Delta_4^1 = \begin{vmatrix} s_{11}^1 & s_{12}^1 & s_{13}^1 & s_{14}^1 \\ s_{12}^1 & s_{22}^1 & s_{23}^1 & s_{24}^1 \\ s_{13}^1 & s_{23}^1 & s_{33}^1 & s_{34}^1 \\ s_{14}^1 & s_{24}^1 & s_{34}^1 & s_{44}^1 \end{vmatrix} > 0 \quad (7)$$

After investigating inequalities (4) - (7) we make conclusion about absolute stability of the system (1).

Let us consider another approach which based on a study of block matrices. We will need some auxiliary results from the theory of matrices.

Lemma 1 [16] Let A be a regular $n \times n$ matrix, B be an $n \times q$ matrix, and C be a $q \times q$ regular matrix.. Let a Hermitian matrix S be represented as

$$S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix}$$

Then the matrix S is positive definite if and only if the matrices A and $C - B^* A^{-1} B$ are positive definite.

Lemma 2 [15, Frobenius formula] Let A be a regular $n \times n$ matrix, B be an $n \times q$ matrix, C be a $q \times n$ matrix D be a $q \times q$ matrix, and the matrix

$$M = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$$

be regular. Then the matrix is regular $R = D - CA^{-1}B$ and

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} A^{-1} + A^{-1}BR^{-1}CA^{-1} & -A^{-1}BR^{-1} \\ -R^{-1}CA^{-1} & R^{-1} \end{bmatrix}.$$

Now we can formulate next stability conditions.

Theorem 2 Suppose that there exist constants

$$h > 0, g_1 > 0, g_2 > 0, \beta > 0, \varsigma > 0,$$

such that the inequalities (4), (5) hold and next matrix

$$\begin{aligned} \tilde{S}_1[h, g_1, g_2, \beta, \varsigma, \nu] = & \begin{bmatrix} s_{33}^1 & s_{34}^1 \\ s_{34}^1 & s_{44}^1 \end{bmatrix} - \\ & - \frac{1}{s_{11}^1 s_{22}^1 - (s_{12}^1)^2} \begin{bmatrix} s_{13}^1 & s_{14}^1 \\ s_{14}^1 & s_{24}^1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} s_{22}^1 & -s_{12}^1 \\ -s_{12}^1 & s_{11}^1 \end{bmatrix} \times \\ & \times \begin{bmatrix} s_{13}^1 & s_{14}^1 \\ s_{14}^1 & s_{24}^1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (8)$$

is positive definite. Then the system (1) is absolutely stable.

Proof. Let be matrix $S_1[h, g_1, g_2, \beta, \varsigma]$ presented in next block form

$$S_1[h, g_1, g_2, \beta, \varsigma] = \begin{bmatrix} S_{11}^1 & S_{12}^1 \\ (S_{12}^1)^T & S_{22}^1 \end{bmatrix},$$

where

$$S_{11}^1 = \begin{bmatrix} s_{11}^1 & s_{12}^1 \\ s_{12}^1 & s_{22}^1 \end{bmatrix},$$

$$S_{12}^1 = \begin{bmatrix} s_{13}^1 & s_{14}^1 \\ s_{23}^1 & s_{24}^1 \end{bmatrix},$$

$$S_{22}^1 = \begin{bmatrix} s_{33}^1 & s_{34}^1 \\ s_{34}^1 & s_{44}^1 \end{bmatrix}.$$

Then according to Lemma 1, for positive definite of matrix $S_1[h, g_1, g_2, \beta, \varsigma]$ necessary and sufficient that matrices

$$S_{11}^1, \quad S_{22}^1 - (S_{12}^1)^T (S_{11}^1)^{-1} S_{12}^1$$

will be positive definite too. In other words, need to be true inequalities (4), (5) and matrix (8) be a positive definite.

The crucial assumption in Theorem 2 is the assumption of positive definiteness of the matrix $S_1[h, g_1, g_2, \beta, \varsigma]$. If we cannot find suitable constants $h > 0$, $g_1 > 0$, $g_2 > 0$, $\beta > 0$, $\varsigma > 0$ to ensure positive definiteness, or such constants do not exist, Theorem 2 is not applicable. In such case, we can modify the control function in system (1) by adding a linear combination of the state function at moment t and $t - \tau$ we will consider modified system

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[x(t) - dx(t - \tau)] &= a_1 x(t) + a_2 x(t - \tau) + \\ &+ bf(\sigma(t) + u(t)), \\ \frac{d}{dt}\sigma(t) &= cx(t) - \rho f(\sigma(t) + v(t)), \end{aligned} \quad (9)$$

where

$$u(t) = c_1 x(t) + c_2 x(t - \tau),$$

$$v(t) = c_3 x(t),$$

c_1, c_2, c_3 are suitable constants.

Let us rewrite system (9) in next form

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[x(t) - dx(t - \tau)] &= (a_1 + c_1)x(t) + \\ &+ (a_2 + c_2)x(t - \tau) + bf(\sigma(t)), \\ \frac{d}{dt}\sigma(t) &= (c + c_3)x(t) - \rho f(\sigma(t)). \end{aligned} \quad (10)$$

In this case matrix of total derivative takes from functional along solution will have next form

$$\begin{aligned} S_2[h, g_1, g_2, c_1, c_2, c_3, \beta, \varsigma] &= \\ &= \begin{bmatrix} s_{11}^2 & s_{12}^2 & s_{13}^2 & s_{14}^2 \\ s_{12}^2 & s_{22}^2 & s_{23}^2 & s_{24}^2 \\ s_{13}^2 & s_{23}^2 & s_{33}^1 & s_{34}^1 \\ s_{14}^2 & s_{24}^2 & s_{34}^1 & s_{44}^1 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

where

$$s_{11}^2 = s_{11}^1 - 2hc_1 - (2ac_1 + c_1^2)g_2,$$

$$s_{12}^2 = s_{12}^1 - (hc_2 + a_1c_2 + a_2c_1 + c_1c_2)g_2,$$

$$s_{13}^2 = s_{13}^1 - c_1g_2d, \quad s_{14}^2 = s_{14}^1 - c_1g_2b - \frac{1}{2}\beta c_3,$$

$$s_{22}^2 = s_{22}^1 - (2a_2c_2 + c_2^2)g_2,$$

$$s_{23}^2 = s_{23}^1 - (c_2a_1 + c_1a_2 + c_2c_1)g_2,$$

$$s_{24}^2 = s_{24}^1 - a_2g_1b.$$

Finding of the stabilization conditions (option 1).

As follows from the Sylvester criterion [14,15] the necessary and sufficient condition for positive definite of the matrix $S_2[h, g_1, g_2, c_1, c_2, c_3, \beta, \varsigma]$ is its main diagonal elements positivity, i.e.

$$\Delta_1^2 = s_{11}^1 - 2hc_1 - (2ac_1 + c_1^2)g_2 > 0, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \Delta_2^2 &= \begin{vmatrix} s_{11}^2 & s_{12}^2 \\ s_{12}^2 & s_{22}^2 \end{vmatrix} = [s_{11}^1 - 2hc_1 - (2ac_1 + c_1^2)g_2] \times \\ &\times [s_{22}^1 - (2a_2c_2 + c_2^2)] - \\ &- [s_{12}^1 - (hc_2 + a_1c_2 + a_2c_1 + c_1c_2)] > 0, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\Delta_3^2 = \begin{vmatrix} s_{11}^2 & s_{12}^2 & s_{13}^2 \\ s_{12}^2 & s_{22}^2 & s_{23}^2 \\ s_{13}^2 & s_{23}^2 & s_{33}^1 \end{vmatrix} > 0, \quad (13)$$

$$\Delta_4^2 = \begin{vmatrix} s_{11}^2 & s_{12}^2 & s_{13}^2 & s_{14}^2 \\ s_{12}^2 & s_{22}^2 & s_{23}^2 & s_{24}^2 \\ s_{13}^2 & s_{23}^2 & s_{33}^2 & s_{34}^2 \\ s_{14}^2 & s_{24}^2 & s_{34}^2 & s_{44}^2 \end{vmatrix} > 0. \quad (14)$$

And stabilization task consist from finding parameters c_1, c_2, c_3 , such that the system (10) will be absolute stable. Set of such parameters is defined by inequalities (10) - (14).

Finding of the stabilization conditions (option 2).

Using the result of Theorem 2, we will give next formulation of positive definiteness. Before, let rewrite matrix $S_2[h, g_1, g_2, c_1, c_2, c_3, \beta, \varsigma]$ at next block form

$$S_2[h, g_1, g_2, c_1, c_2, c_3, \beta, \varsigma] = \begin{bmatrix} S_{11}^2 & S_{12}^2 \\ (S_{12}^2)^T & S_{22}^2 \end{bmatrix},$$

where

$$S_{11}^2 = \begin{bmatrix} s_{11}^2 & s_{12}^2 \\ s_{12}^2 & s_{22}^2 \end{bmatrix},$$

$$S_{12}^2 = \begin{bmatrix} s_{13}^2 & s_{14}^2 \\ s_{23}^2 & s_{24}^2 \end{bmatrix},$$

$$S_{22}^2 = \begin{bmatrix} s_{33}^2 & s_{34}^2 \\ s_{34}^2 & s_{44}^2 \end{bmatrix}.$$

As follows from condition of positive definiteness of block matrices (Lemma 1), for positive definiteness of matrix $S_2[h, g_1, g_2, c_1, c_2, c_3, \beta, \varsigma]$ necessary and sufficient that the matrices

$$S_{11}^2, \quad S_{22}^2 - (S_{12}^2)^T (S_{11}^2)^{-1} S_{12}^2$$

will be positive definite too.

3 Conclusions

In this brief, we deal with the stabilization problem for a class of nonlinear control systems with state deviating argument of neutral type. Based on direct Lyapunov method (Lyapunov-Krasovskii approach) several stabilization criteria have been given in terms of a set of matrix algebraic inequalities. A new sufficient condition, which guarantees the close-loop system is

absolutely stable, is presented. In recent years, the absolute stability problem of nonlinear control systems with aftereffect and, in particular, the stabization problem of the same system are a topic of great practical importance which has attracted a lot of interests. Author presented some of the same results at scientific conferences [20-22], and it aroused a great interest. The results can be extended to the case of multidimensional neutral type nonlinear control process.

Acknowledgements

The author would like to thank for support to the budget program 2201250 of The Ministry of Education and Science of Ukraine "Study and training of students, scientist and teachers on abroad" of 2012/2013.

References

1. Lur'e A. Some Problems in the Theory of Automatic Control. H.M. Stationary Office, London, 1957
2. Aizerman M., Gantmacher F. Absolute Stability of Regulator Systems. Holden-Day, San Francisco, 1964.
3. Chukwu E.N. Stability and time-optimal control of hereditary systems with application to the economics dynamics of US. 2nd Edition. World Sc. Publ. Co. – 2001. – 495p.
4. Liao X., Wang L., Yu P. Stability of Dynamical Systems. Monograph. Series on Nonlinear Science and Complexity. Elsevier. Amsterdam, 2007.
5. Liao X., Yu P. Absolute stability of nonlinear control systems. – New York: Springer Science + Business Media B.V., 2008.
6. Khusainov D.Ya., Shatyrko A.V. Lyapunov Functions Method in Investigation of Function-Differential Systems. KNU Publ., Kiev, 1997. (in Russian).
7. Shatyrko A.V., Khusainov D.Ya. Stability of Nonlinear Control Systems with Aftereffect. Inform.-Analit. Agency Publ., Kyiv, 2012. (in Ukrainian).
8. Shatyrko A.V., Khusainov D.Ya., Diblik J., Bastinec J., Rivilova A. Estimates of perturbations in neutral type nonlinear indirect control systems // J. Cybernetics and Computer Engineering – 2010. Iss.160, P.72-85. (in Russian)

9. *Shatyrko A.V., Khusainov D.Ya., Diblik J, Bastinec J, Rivolova A.* Estimates of perturbation of nonlinear indirect interval control system of neutral type // International Sc.-Tech. J. «Problems of control and informatics» - 2011, №1. C.15 – 29.

10. *Shatyrko A.V., Khusainov D.Ya., Diblik J, Bastinec J, Rivolova A.* Estimates of perturbation of nonlinear indirect interval control system of neutral type // Journal of automation and information science. – 2011. Vol.43, Iss.1, P.13-28.

11. *Popov V.M.* Hyperstability of Control Systems. New York: Springer, 1973.

12. *Yakubovich A., Leonov G., Gelig A.* Stability of Stationary Sets in Control Systems with Discontinuous Nonlinearities. World Scientific. Singapore, 2004.

13. *Dong Y., Liu J.* Exponential stabilization of uncertain nonlinear time-delay systems // Advances in Difference Equations. – doi:10.1186/1687-1847-2012:180.

14. *Shatyrko A., Diblik J., Khusainov D., Ruzickova M.* Stabilization of Lur'e-type nonlinear control systems by Lyapunov-Krasovski functionals // Advances in Difference Equations. – doi:10.1186/1687-2012-229.

15. *Shatyrko A.* Stabilization in Lurie-type nondirect control systems by Lyapunov-Krasovsky's functional // Bull. of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series: Phys.&Math. Iss.1, Kyiv, 2012. P243-246. (in Ukrainian).

16. *Shatyrko A.* Stabilization problem of Lurie-type direct control system by Lyapunov-Krasovskiy's functional // Bull. of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series: Phys.&Math. Iss.2, Kyiv, 2012. P.257-260. (in Ukrainian).

17. *Shatyrko A., Khusainov D.* Stabilization of scalar processes of direct regulator of neutral type // Bull. of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series: Phys.&Math. Iss.2, Kyiv, 2013. C.241-244 (in Ukrainian).

18. *Hornn R., Johnson C.* Matrix Analysis. Cambridge University Press, Cambridge. 1985.

19. *Gantmacher F.* Theory of Matrices. Nauka, Moscow. 1968. (in Russian).

20. *Shatyrko A.* Stabilization in Lurie-type nonlinear control systems by Lyapunov-Krasovsky's functional / Abstracts. Conference CDDEA-2012. Terchova, Slovak Republic, 2012. P.47-48.

21. *Shatyrko A.V.* Stabilization of nonlinear control systems with time-delay to absolute stabil-

ity state / V International Conference «Calculus and Applied Mathematics», Abstracts. Kyiv-2012, P.91. (in Ukrainian).

22. *A. Kolechkina, Ronald R.P. van Nooijen, A. Shatyrko.* Stabilization of nonlinear Lurie-type control processes of neutral type in scalar case // XVI International Conference "DSMSI-2013". Abstract. Kiev, Ukraine. 2013. P.335.

Надійшла до редколегії 15.07.2013

УДК 550.38:519.6

V.O. Yatsenko¹, Ph.D, Associate Professor
O.I. Kochkodan², Graduate student,
M.V. Makarychev³, Graduate student
I.S. Pashenkovska⁴, Student
S.O. Cheremnih⁵, Graduate student

Linear and nonlinear analysis of time series: correlation dimension, Lyapunov exponents, and prediction

This paper focuses on reconstruction of dynamic models of geomagnetic indexes using satellite data. The possibility to calculate Lyapunov exponents for prediction the predictability.

Key Words: modelling, Lyapunov exponents, correlation dimension, prediction, chaos.

¹ Space Research Institute of NASU-NSAU, 03680, Kyiv, Akademik Glushkov str., 40, e-mail: vyatsenko@gmail.com

² Space Research Institute of NASU-NSAU, 03680, Kyiv, Akademik Glushkov str., 40, e-mail: o.kochkodan@gmail.com

³ Space Research Institute of NASU-NSAU, 03680, Kyiv, Akademik Glushkov str., 40, e-mail: mmakarychev@yahoo.com

⁴ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova av., 4d, e-mail: piramss@yandex.ru

⁵ Space Research Institute of NASU-NSAU, 03680, Kyiv, Akademik Glushkov str., 40, e-mail: oleg.semeniv@gmail.com

Яценко В.О.¹, д.т.-н., професор
Кочкодан О.І.², аспірант,
Макаричев М.В.³, аспірант
Пашенковська І.С.⁴, студент
Черемних С.О.⁵, аспірант

Лінійний і нелінійний аналіз часового ряду: кореляційна розмірність, показники Ляпунова та прогнозування

В даній роботі на основі методу реконструкції динамічної моделі побудована модель геомагнітного індексу на основі супутникових даних. Показана можливість застосування показників Ляпунова для обчислення горизонту прогнозу.

Ключові слова: моделювання, показники Ляпунова, кореляційна розмірність, прогнозування, хаос.

¹ Інститут космічних досліджень НАНУ-НКАУ, 03680, м. Київ, вул. Академіка Глушкова, 40, e-mail: vyatsenko@gmail.com

² Інститут космічних досліджень НАНУ-НКАУ, 03680, м. Київ, вул. Академіка Глушкова, 40, e-mail: o.kochkodan@gmail.com

³ Інститут космічних досліджень НАНУ-НКАУ, 03680, м. Київ, вул. Академіка Глушкова, 40, e-mail: mmakarychev@yahoo.com

⁴ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр.-т Глушкова 4д, e-mail: piramss@yandex.ru

⁵ Інститут космічних досліджень НАНУ-НКАУ, 03680, м. Київ, вул. Академіка Глушкова, 40, e-mail: oleg.semeniv@gmail.com

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

1 Introduction

Reconstruction of dynamic models of geomagnetic indexes focuses on time domain techniques to identify a dynamical model for the evolution of the *Dst*-index under the influence of the solar wind.

Frequency domain analysis of this model is used to study spectral properties of the *Dst*-index dynamics. These properties indicate that the dynamics of the *Dst*-index is similar to that of a linear oscillator under the action of an external force.

2 Methods

2.1. Localized Lyapunov exponents and the prediction of predictability

The prediction of chaotic systems is a significant real-world but challenging open problem [1-16]. By definition, chaotic systems display sensitive dependence on initial conditions: two initially close trajectories can diverge exponentially in the phase space with a rate given by the largest Lyapunov exponent λ_1 . If the initial perturbation is of size δ , and the accepted error tolerance, Δ , is still small, then the largest Lyapunov exponent λ_1 gives a rough estimate of the predictability time: $T_p = \frac{1}{\lambda_1} \ln \left(\frac{\Delta}{\delta} \right)$.

2.2. Robust estimates of correlation dimension

Analysis of nonlinear dynamics plays an important role in science. Especially low-dimensional chaos has been found in various natural and technical systems, e.g., space weather, EEG signals during sleep, or the cardiovascular system [17-28]. One of the important invariant measures to characterize a time series generated by nonlinear dynamics is the correlation dimension D . Following in the lines of Grassberger and Procaccia the fractal dimension of the attractor can be estimated from a time series by using the power law behavior of the correlation sum. Suppose we have a scalar time series $x_1, x_2, \dots, x_{N_f}$

We make time-delay reconstruction of the phase space with the reconstructed vectors:

$$V_N = (x_n, x_{n=\tau}, \dots, x_{n=(d-1)\tau}), \quad (1)$$

where τ is time-delay, d is embedding dimension, and $n = (d-1)\tau + 1, \dots, N_f$. Following the embedding theorem there generically exist a function

$F: R^d \rightarrow R$ such that

$$x_{n+1} = F(V_n), \quad (2)$$

if d is sufficiently large. Then problem is how to choose the τ and d , i.e. time-delay and embedding dimension, such that the above equation exists.

To choose the embedding dimension d_e , we minimize the average absolute prediction errors E , i.e.

$$d_e = \arg \min \{E(d)\} : 1 \leq d \leq D_{\max},$$

where $D_{\max}$ is the maximum dimension we define in searching for the minimum value of $E(d)$.

2.3. Experimental data

The time series that characterize the solar wind consist from multidimensional components. These components increase the dimensionality of the model input; as a result the complexity of the identification problem significantly increases. It would be shown, that the identification problem can be reduced to the solving of the corresponding mathematical programming problem with constraints. Such approach substantially differs from the widely used statistical methods, where the great number of input variables is exploited. This paper focus on a novel approach to reconstructing guaranteed prediction interval, so called "prediction tube".

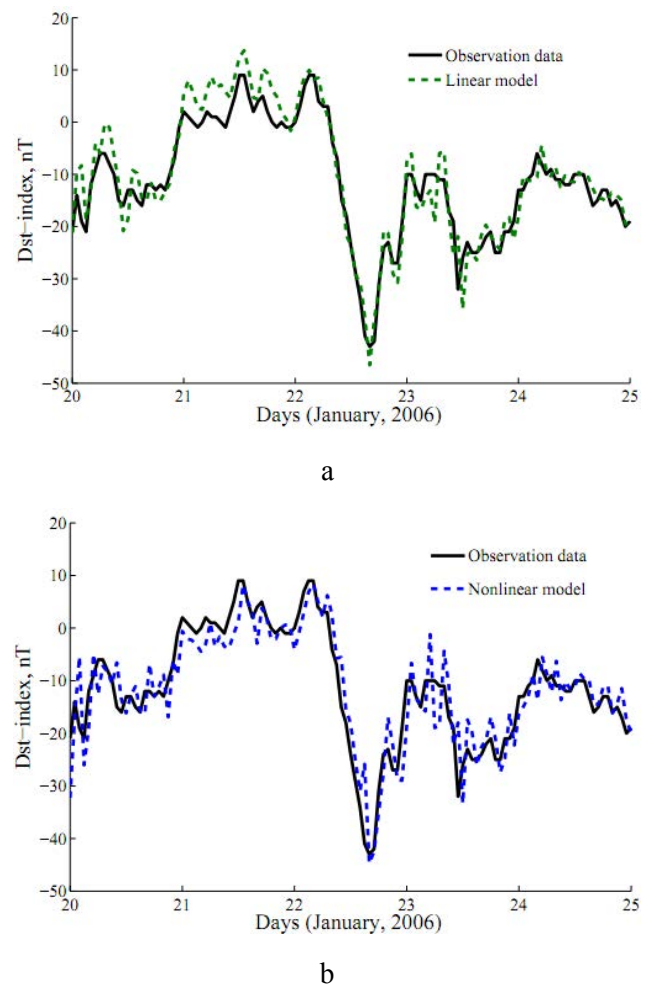


Figure 1. Illustration of Dst -index modelling: a – linear model (3); b – nonlinear model (4)

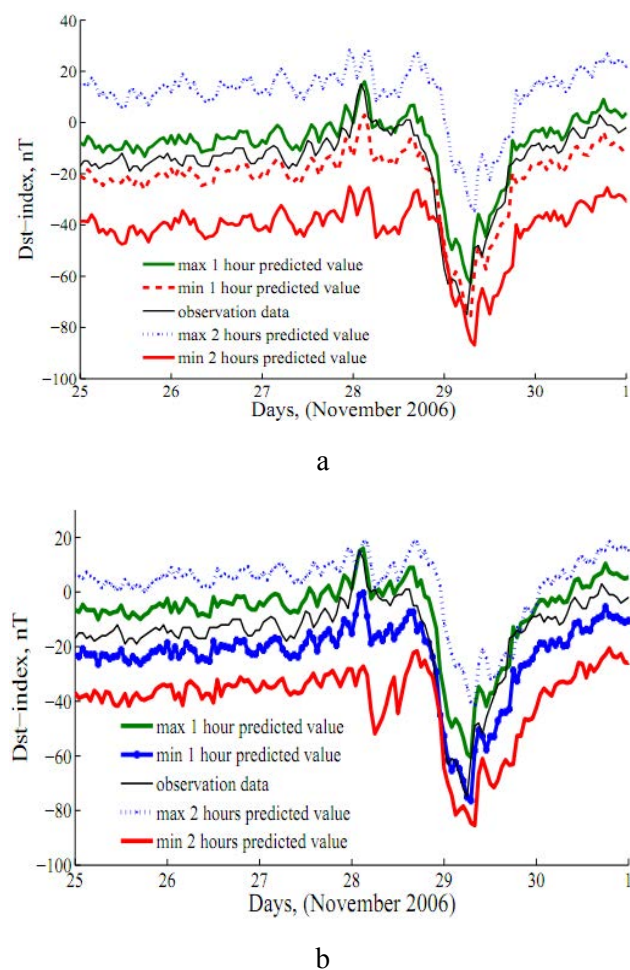


Figure 2. *Dst*-index observation data and results of guarantee prediction for one and two hours: a – linear model (3); b – nonlinear model (4)

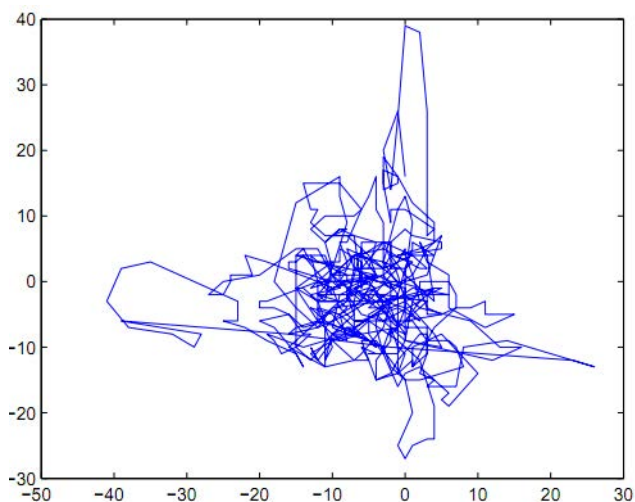


Figure 3. Phase space of *Dst*-index for 01.2012 (744 values)

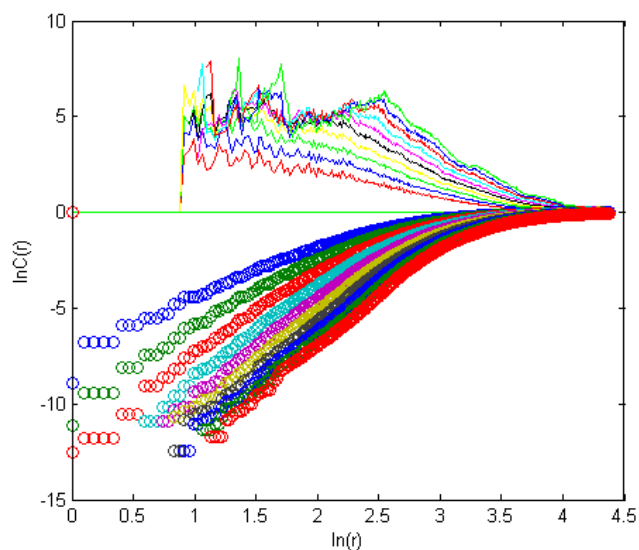


Figure 4. Combination of two plots: circles shows the dependency between correlation function of the distance between points; lines show derivatives of this function. Average values of these derivatives are:

- $n=2$: 0,9933735
- $n=3$: 1,3245144
- $n=4$: 1,7477829
- $n=5$: 2,1931131
- $n=6$: 2,6238707
- $n=7$: 3,0793864

The correlation dimension is equal 3,2.

3 Results

Two models, linear and nonlinear were reconstructed with the constraints of lags $n_y = 24$, for *Dst*-index guaranty prediction. First model was identified only from most significant linear regressors $\beta = 1$

$$y(k) = 1.25y(k-1) - 0.35y(k-2) + 2.5u(k) + 0.15y(k-3) + 0.01y(k-6) - 2.74u(k-1) + 0.95u(k-2) - 0.2u(k-4) + 0.14u(k-8) \quad (3)$$

And the second one was identifier using linear and nonlinear nodes $\beta = 0$

$$\begin{aligned} y(k) = & 2.5u(k) - 3.13u(k-1) + 0.65u(k-2) \\ & - 0.13u(k-4) + 0.19u(k-8) + 0.11u(k-12) \\ & - 0.03u(k-14) + 0.07u(k-25) + 1.17y(k-1) \\ & - 0.41y(k-2) + 0.12y(k-3) + 0.04y(k-6) \\ & + 0.02y(k-12) - 0.004y(k-17) \\ & - 0.03u(k-3)y(k-9) + 0.01u(k-7)y(k-12) \\ & + 0.01y(k-15)u(k-1) + 0.03u(k-15)u(k-6) \quad (4) \\ & - 0.003y(k-13)y(k-17) \\ & + 0.03y(k-20)u(k-4) \\ & - 0.05y(k-21)u(k-4) - 0.35u(k-1)u(k-1) \\ & + 0.03u(k-16)y(k-2) \\ & - 0.022y(k-12)u(k-2) \\ & + 0.002y(k-15)y(k-12) - 0.2u(k-1)u(k-3). \end{aligned}$$

The models (3) and (4) structure and parameters were numerically determined using the identification algorithm and data set of measurements for $N=2000$ hours. The parameter β was used for models accuracy test. On the figure 2.a the results of Dst -index behavior modeling using models (3) and (4) are shown together with observations. The analysis of $u(k)$ behavior on the 150 hours time interval before time moment k was made for determination of the the maximum changes of the $u(k)$ and value of the δ . On the figure 2.b are shown the results of Dst -index prediction if interval of estimation using models (3) and (4).

Let us conduct the analysis of the interval d_q change when $q=1$ for the simplest case, on the example of the linear model (3). We can show that

$$\begin{aligned} \underline{y}(k+1) = & \min[1.255y(k) - 0.355y(k-1) \\ & + 0.153y(k-2) + 0.013y(k-5) + 2.5(u(k) \\ & - \Delta u(k)) - 2.74u(k) + 0.95u(k-1) \\ & - 0.2u(k-3) + 0.14u(k-7)], \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \bar{y}(k+1) = & \max[1.255y(k) - 0.355y(k-1) \\ & + 0.153y(k-2) + 0.013y(k-5) + 2.5(u(k) \\ & - \Delta u(k)) - 2.74u(k) + 0.95u(k-1) \\ & - 0.2u(k-3) + 0.14u(k-7)], \end{aligned} \quad (6)$$

and then conduct the numerical modeling of the $\{\underline{y}(k+1); \bar{y}(k+1)\}$ values change subject to $\Delta u_j(k)$.

It is obviously that $\bar{y}(k+1)$ reaches it's maximum at

$\Delta u_j(k) = \delta$, and $\underline{y}(k+1)$ reaches the minimum at $\Delta u_j(k) = -\delta$. Then

$$\underline{y}(k+1) = f(y, u) - 2.5\delta,$$

$$\bar{y}(k+1) = f(y, u) + 2.5\delta,$$

where

$$\begin{aligned} f(y, u) = & 1.255y(k) - 0.355y(k-1) \\ & + 0.153y(k-2) + 0.013y(k-5) + 2.5(u(k) \\ & - \Delta u(k)) - 2.74u(k) + 0.95u(k-1) \\ & - 0.2u(k-3) + 0.14u(k-7). \end{aligned} \quad (7)$$

Let us represent the change of the interval d_1

$$d_1 = |\underline{y}(k+1) - \bar{y}(k+1)| \leq 5\delta + 2\varepsilon,$$

where ε is the model accuracy error.

Now let us consider the dependence of d_q from δ during the estimation of $\tilde{y}(k+q)$, $q=2$. For this purpose let us rewrite (5) and (6) for $k+2$ time moment

$$\underline{y}(k+2) = f'(y, u) - 5.3975\delta,$$

$$\bar{y}(k+2) = f'(y, u) + 5.3975\delta,$$

where

$$\begin{aligned} f'(y, u) = & 1.22y(k) - 0.29y(k-1) + 0.19y(k-2) \\ & + 0.01y(k-4) + 0.02y(k-5) + 0.89u(k) \\ & + 1.19u(k-1) - 0.2u(k-2) - 0.25u(k-3) \\ & + 0.14u(k-6) + 0.18u(k-7). \end{aligned}$$

As result the interval d_2 of the value $\tilde{y}(k+2)$ can be represented as

$$d_2 = |\underline{y}(k+2) - \bar{y}(k+2)| \leq 10.795\delta + 4.51\varepsilon.$$

Obviously, when q increases, the d_q value will also increase. Also it can be seen that using nonlinear model in the case $q > 2$ leads to quicker increase of d_q value. However, by using the methods of optimization it is possible to conduct the adaptive calculation of value δ when internal d_q will be minimal. In further research, we will examine the problem of prediction interval estimation solving the minimax mathematical programming problem.

4 Conclusions

This paper concentrates on the following problems: (a) empirical time series prediction with nonlinear autoregressive moving-average models; (b) dynamical-information approach to prediction of space weather; (c) estimation of Lyapunov exponents of time series from geomagnetic indexes; (d) dynamic probabilistic risk analysis of satellite devices with complex characterizations for damages using a physical model of elements and a predictable level of ionizing radiation and space weather; (e) spatio-temporal nonlinear and bilinear modelling the amplitude and location of the disturbance as a function of space, as well as its time evolution; (f) optimization techniques to identification of dynamical models using geomagnetic indexes. The local and global Lyapunov exponents based on infinitesimal uncertainty dynamics are considered to reflect an optimal predictability. An error analysis in bilinear dynamics is also used to develop criteria necessary for progress evaluation in space weather. Numerical results of *Dst*-index prediction are shown.

A new approach to geomagnetic *Dst*-index prediction using satellite observation data of solar wind parameters has been described. It is based on the reconstruction of a nonlinear discrete dynamical input-output system with several input variables [29-32]. A model structure, as well as its parameters are chosen by solving the constraint mathematical programming problem. An advantages of this approach are: 1) automatical selection of the appropriate input variables; 2) using an optimization method based on genetic algorithms for simultaneous search of the optimal model structure and its parameters. The problem of a guaranty prediction is also considered. The dependence between the prediction interval and the input model parameters changes has been discovered. It is shown that the prediction error is nonlinearly rising with the increase of the prediction time. The numerical calculations shown the possibility of forecasting horizon extension by using optimization methods. Also the possibility of real time prediction of *Dst*-index has been implemented.

Список використаних джерел

1. *Iasemidis L.D., Sackellares J.C., Zaveri H.P., and Williams W.J.* Phase Space Topography of the Electrocorticogram and Lyapunov Exponent in Partial Seizures / *Brain Topography* Vol. 2. – NY, 1990. – P. 187-201.
2. *Iasemidis L.D.* The Temporal Evolution of the Largest Lyapunov Exponent on the Human Epileptic Cortex, Measuring chaos in the human brain / L.D. Iasemidis, D.W. Duke and W.S. Prichard. - Republic of Singapore, 1991. – P. 49-82.
3. *Iasemidis L.D.* Chaos Theory and Epilepsy / L.D. Iasemidis and J.C. Sackellares // *The Neuroscientist*. – 1996. Vol. 2. – P. 118-126.
4. *Shiau D.S.* Dynamical Resetting of the Human Brain at Epileptic Seizures: Application of Nonlinear Dynamics and Global Optimization Techniques / D.S. Shiau, J.C. Sackellares, P.M. Pardalos // *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*. – 2004. Vol. 51. – P. 493-506.
5. *Nair S.P.* Dynamical Changes in the Rat Chronic Limbic Epilepsy Model / S.P. Nair, D.S. Shiau, W.M. Norman, and others // *Epilepsia*. – 2004. Vol. 45-57 – P. 211-212.
6. *Ramaswamy R.* Targeting Chaos through Adaptive Control / R. Ramaswamy, Sinha, and S. Gupte // *Physical Review E*. – 1998. Vol. 57. – P. 2507-2510.
7. *Wang X.F.* Anticontrol of Chaos in Continuous-Time Systems via Time-Delay Feedback / X.F. Wang, G.Chen, and X.Yu // *Chaos*. – 2000. Vol. 10. – P. 771-779.
8. *Morgul O.* Model Based Anticontrol of Discrete-Time Systems, *Proceedings of the 42nd IEEE Conference on Decision and Control*. – 2003. – P. 1895-1896.
9. *Glass L.* From Clocks to Chaos / L. Glass, and Mackey // *The Rhythms of Life*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey. – 1988.
10. *Iasemidis L.D.* Transition to Epileptic Seizures: An Optimization Approach into its Dynamics / L.D. Iasemidis, D.S. Shiau, P.M. Pardalos, and J.C. Sackellares // *Discrete Problems with Medical Applications*, Edited by D.Z. Du, P.M. Pardalos and J. Wang, DIMACS Series. - American Mathematical Society, Providence, Rhode Island. – 2000. Vol. 55. – P. 55-74.
11. *Yatsenko V.A., Pardalos P.M., Sackellares J.C.* Geometric Models, Fiber Bundles, and Biomedical Applications / V.A. Yatsenko, P.M. Pardalos, J.C. Sackellares, and others // *Proceedings of the 5th International Conference on Symmetry in Nonlinear Mathematical Physics*. Institute of Mathematics. – 2004. Vol. 3. – P. 1518-1525.

12. *Pardalos P.M.* Seizure Warning Algorithm Based on Optimization and Nonlinear Dynamics / P.M. Pardalos, W. Chaovalitwongse, Iasemidis and others // *Mathematical Programming*. – 2004. Vol. 101. – P. 365-385, 493-506.
13. *Iasemidis L.D.* Prediction of Human Epileptic Seizures Based on Optimization and Phase Changes of Brain Electrical Activity / L.D. Iasemidis, P.M. Pardalos, D.S. Shiau, and others // *Optimization Methods and Software*. – 2003. Vol. 8. – P. 81-104.
14. *Kaneko K.* Periodic-Doubling of Kink-Antikink Patterns, Quasiperiodicity in Antiferro-Like Structures and Aptial Intermittency in Coupled Logistic Lattice / K. Kaneko // *Progress of Theoretical Physics*. – 1984. Vol. 72. – P. 480-486.
15. *Ding M.* Stability of Synchronous Chaos and On-Off Intermittency in Coupled Map Lattices / M. Ding, and W. Yang // *Physical Review E*. – 1997. Vol. 56. – P. 4009-4016.
16. *Amritkar R.E.* Stability of Periodic Orbits of Coupled-Map Lattices / R.E. Amritkar, P.M. Gade, A.D. Gangal, and V. M. Nandkumaran // *Physical Review A*. – 1991. Vol. 44. – P. 3407-3410.
17. *Sharifi J., Araabi B.N., Lucas C.* Multi-step prediction of *Dst*-index using singular spectrum analysis and locally linear neurofuzzy modeling / J. Sharifi, B.N. Araabi, C. Lucas // *Earth Planets Space*. – 2006. – 58 (3). P. 331-341.
18. *Anh V., Yu Z., Wanliss J., Watson S.* Prediction of magnetic storm events using the *Dst*-index / V. Anh, Z. Yu, J. Wanliss, S. Watson // *Nonlin. Processes Geophys.* – 12. – 2005. – P. 799-746.
19. *Yu Z.G., Anh V.V., Wanliss J.A., Watson S.M.* Chaos game representation of the *Dst*-index and prediction of geomagnetic storm events / Z.G. Yu, V.V. Anh, J.A. Wanliss, S.M. Watson // *Chaos Solition. Fract.* – 31. – 2007. – P. 736-746.
20. *Minoux M.* Mathematical Programming: Theory and Algorithm / M. Minoux // John Wiley and Sons. – 1986. – 489 p.
21. *Temerin M., Li X.* A new model for the prediction of *Dst* on the basis of the solar wind / M. Temerin, X. Li // *J. Geophys. Res.* – 2002. V. 107 (A12) Art. No. 1472.
22. *Wei H.L., Zhu D.Q., Billings S.A., Balikhin M.A.* Forecasting the geomagnetic activity of the *Dst*-index using multiscale radial basis function networks / H.L. Wei, D.Q. Zhu, S.A. Billings, M.A. Balikhin // *Advances in Space Research*. – 2007. – 40. – P. 1863-1870.
23. *Hansimeier A.* The sun and space wheather / A. Hansimeier – New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow: Kluwer Academic Publisher. – 2002. – 243 p.
24. *Wang H.* Space weather: scientific forecasting / H. Wang // *COSPAR Colloquium: Solar-Terrestrial Magnetic Activity and Space Environment*. Beijing, China. – 2001. – 55 p.
25. *Gussenhoven M.S. et al.* Philips Laboratory Space Phisics Division Radiation Models / M.S. Gussenhoven et al. // In: “Radiation Belts. Models and Standards”. *Geophysical Monograph*. – V. 97. – 1996. – 93 p.
26. *Goodman J.M.* Space Weather & Telecommunication / J.M. Goodman – New York: The Kluwer International Series in Engineering & Computer Science. Springer Science + Business Media Inc. – 2005. – 382 p.
27. *Daglis I.A.* Effects of Space Weather on Technology Infrastructure / I.A. Daglis – NATO Science Series. Kluwer Academic Publisher. – 2004. – 334 p.
28. *Goertz C.K., Shan L.H., Smith R.A.* Prediction of geomagnetic activity / C.K. Goertz, L.H. Shan, R.A. Smith // *J. Geophys.* – 1993. – 98. – P. 7673-7684.
29. *Nicolis G., Prigogine I.* Exploring complexity: An introduction / G. Nicolis, I. Prigogine. – New York: W.H. Freeman. – 1998. – 328 p.
30. *Chia R.* From complexity science to complex thinking: Organizations as simple location / R. Chia // *Organization*. – 1998. Vol. 5. – P. 341-369.
31. *Fuller T., Moran P.* Small enterprises as complex adaptive systems: a methodological question / T. Fuller, P. Moran // *Entrepreneurship and Regional Development*. – 2001. Vol. 13. – P. 47-63.
32. *White M.C., Marin D.B., Brazeal D.V., Friedman W.H.* The Evolution of organization: Suggestions from complexity theory about the interplay between natural selection and adaptation / M.C. White, D.B. Marin, D.V. Brazeal, W.H. Friedman // *Human Relations*. – 1997. Vol. 50. – P. 1383-1401.

Надійшла до редколегії 17.09.13

УДК 517.9

Анікушин А.В.¹, к.ф.-м.н.

Узагальнена розв'язність гіперболічних інтегро-диференціальних рівнянь

Доведено апіорні оцінки в негативних нормах для інтегро-диференціального оператора гіперболічного типу. Сформульовано теорему узагальненої розв'язності.

Ключові слова: гіперболічне рівняння, інтегро-диференціальне рівняння, апіорні оцінки, узагальнена розв'язність.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т Глушкова 4д,
e-mail: anik_andrii@ukr.net

A.V. Anikushyn¹, PhD.

Generalized solvability of hyperbolic integro-differential equations

We provide a priori inequalities for integro-differential operator of hyperbolic type. Moreover, we formulate the theorem about existence and uniqueness of generalized solution.

Key Words: hyperbolic equation, integro-differential equation, a priori inequalities, generalized solvability.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova av., 4d,
e-mail: anik_andrii@ukr.net

Статтю представив д.т.н., проф. Кудін В.І.

1. Вступ

Необхідність розвитку математичних моделей різних природних та соціально-економічних процесів, дослідження коректності їх постановок, існування оптимального керування, передбачає, зокрема, проведення дослідження нових класів інтегро-диференціальних рівнянь. Цей клас з одного боку дозволяє більш детально і точно побудувати математичну модель природного явища (напр. при наявності «пам'яті» матеріалу [1],[2]), а з іншого є менш дослідженим ніж диференціальні рівняння з частинними похідними.

Сучасні дослідження в фізиці, біології, хімії часто приводять до розгляду деяких інтегро-диференціальних рівнянь. Зокрема, у монографії [3], розглянуто нові математичні моделі, що зводяться до рівнянь еліптичного типу. Вони виникають при дослідженні електронно-іонних хвиль в холодній «замагніченій» плазмі,

низькочастотних електронних магнітно-звукових хвиль, електронних хвиль в холодній плазмі у зовнішньому полі тощо.

У цитованій роботі показано, що наведені моделі можна звести до лінійних рівнянь соболевського типу високого порядку. Слід зауважити, що таке зведення вдається зробити через специфіку ядер, присутніх в цих рівняннях. У загальному випадку такий метод не може бути застосований.

У 80-х рр. XX ст. С.І.Ляшко запропонував досліджувати існування та єдиність розв'язку диференціальних рівнянь з частинними похідними, ґрунтуючись на теорії оснащених просторів та методі апіорних оцінок в негативних нормах [4],[5].

Зокрема, використовуючи цю методику у роботі [6] було доведено нові теореми узагальненої розв'язності для гіперболічного

диференціального рівняння та досліджено питання керованості.

Методика апіорних оцінок в негативних нормах виявилася корисною і при дослідженні інтегро-диференціальних рівнянь. Зокрема за допомогою розроблених методів і прийомів рівняння, зазначені в [3], можна досліджувати безпосередньо і не зводити їх до диференціальних рівнянь високого порядку. Так у роботі [7] було досліджено інтегро-диференціальні оператори еліптичного типу, що узагальнюють рівняння з [3], а в роботі [8] — оператори параболічного типу.

У данній роботі за допомогою методики апіорних оцінок в негативних нормах досліджується існування та єдиність узагальненого розв'язку для інтегро-диференціального оператору гіперболічного типу.

2. Основні позначення

У циліндричній області $(t, x) \in Q = (0, T) \times \Omega$, де $\Omega \subset R^n$ — обмежена однозв'язна область з регулярною межею $\partial\Omega$, розглянемо функцію стану системи $u(t, x)$. Функція стану задовольняє інтегро-диференціальне рівняння

$$L_t u \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + Au + Bu = f(t, x). \quad (1)$$

Оператор A не залежить від змінної t і задається диференціальним виразом другого порядку

$$Au \equiv - \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(x) \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) + \sum_{i=1}^n a_i(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} + a(x)u.$$

Будемо вважати, що $a_{ij} = a_{ji}$ і оператор A є рівномірно еліптичним в області $\bar{\Omega}$, тобто виконується нерівність

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \lambda_i \lambda_j \geq \alpha \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \quad (2)$$

для довільних дійсних λ_i , де α — додатна стала, що не залежить від $x \in \bar{\Omega}$ і $\lambda_i \in R$. Інтегральна частина задається виразом

$$Bu = \int_0^t \sum_{i=1}^n K_i(t, \tau) u_{x_i x_i}(x, \tau) d\tau. \quad (3)$$

Ядра $K_i(t, \tau)$ — неперервні на $[0, T]^2$ та неперервно-диференційовні за змінною τ . Через u' будемо позначати першу похідну функції $u(t, x)$ за змінною t . Введемо для диференціальної частини оператора L_t спеціальне позначення

$$Lu \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + Au. \quad (4)$$

Покладемо $\Gamma = (0, T) \times \partial\Omega$. Шукана функція $u(t, x)$ задовольняє початкові

$$u|_{t=0} = \frac{\partial u}{\partial t}|_{t=0} = 0 \quad (5)$$

та крайові умови

$$u|_{\Gamma} = 0. \quad (6)$$

Через L_0 позначимо множину функцій $u(t, x) \in C^\infty(\bar{Q})$, що задовольняють умови (5) і (6). L_T — множина функцій $v(t, x) \in C^\infty(\bar{Q})$, що задовольняють умови

$$v|_{\Gamma} = 0, \quad v|_{t=T} = \frac{\partial v}{\partial t}|_{t=T} = 0. \quad (7)$$

Як і в роботі [6] введемо до розгляду спеціальні простори. Нехай H_0^1 , V_0^1 , S_0^0 — поповнення множини L_0 за нормами

$$\begin{aligned} \|u\|_{H_0^1}^2 &= \int_Q (u')^2 + \sum_{i=1}^n u_{x_i}^2 dQ, \\ \|u\|_{V_0^1}^2 &= \|u\|_{H_0^1}^2 + \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} u_{x_i}^2|_{t=T} d\Omega, \\ \|u\|_{S_0^0}^2 &= \int_Q u^2 + \sum_{i=1}^n \left(\int_0^t u_{x_i} d\tau \right)^2 dQ + \\ &+ \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \left(\int_0^T u_{x_i} d\tau \right)^2 d\Omega + \int_{\Omega} u^2|_{t=T} d\Omega \end{aligned}$$

відповідно, H_T^1 , V_T^1 , S_T^0 — поповнення множини L_T за нормами

$$\begin{aligned}\|v\|_{H_T^1}^2 &= \int_Q (v')^2 + \sum_{i=1}^n v_{x_i}^2 dQ, \\ \|v\|_{V_T^1}^2 &= \|v\|_{H_T^1}^2 + \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} v_{x_i}^2|_{t=0} d\Omega, \\ \|v\|_{S_T^0}^2 &= \int_Q v^2 + \sum_{i=1}^n \left(\int_0^T v_{x_i} d\tau \right)^2 dQ + \\ &+ \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \left(\int_0^T v_{x_i} d\tau \right)^2 d\Omega + \int_{\Omega} v^2|_{t=0} d\Omega\end{aligned}$$

відповідно.

Зауваження 1. Мають місце щільні та неперервні вкладення

1. $V_0^1 \subset H_0^1 \subset S_0^0$;
2. $V_T^1 \subset H_T^1 \subset S_T^0$.

Нехай $(H_0^1)^*$, $(V_0^1)^*$, $(S_0^0)^*$, $(H_T^1)^*$, $(V_T^1)^*$, $(S_T^0)^*$ відповідні спряжені простори, $\langle \cdot, \cdot \rangle_{H_0^1}$ — природна білінійна форма на $(H_0^1)^* \times H_0^1$. На інших парах просторів також задані відповідні білінійні форми.

Застосовуючи формулу інтегрування частинами, неважко впевнитися, що для довільних гладких в $\bar{Q}$ функцій $u(t, x) \in L_0$, $v(t, x) \in L_T$, f , що задовольняють рівність $L_T u = f$, має місце рівність

$$\begin{aligned}-(u_t, v)_{L_2(Q)} + \sum_{i,j=1}^n \left(a_{ij} u_{x_i}, v_{x_j} \right)_{L_2(Q)} + \sum_{i=1}^n \left(a_i u_{x_i}, v \right)_{L_2(Q)} + \\ + (au, v)_{L_2(Q)} - \sum_{i=1}^n \left(\int_0^t K_i u_{x_i} d\tau, v_{x_i} \right)_{L_2(Q)} = (f, v)_{L_2(Q)}.\end{aligned}\quad (8)$$

Будемо вважати, що коефіцієнти a_{ij} , a_i , a — неперервні в $\bar{\Omega}$ функції. Ліва частина рівності (8) визначена для довільних $u \in H_0^1$, $v \in H_T^1$. Це дає можливість розглядати ліву частину (8) як означення оператора $\bar{L}_l : H_0^1 \rightarrow (H_T^1)^*$, що визначений для всіх $u \in H_0^1$. Легко впевнитися, що $\bar{L}_l$ — лінійний оператор. Та сама ліва частина (8) визначає і лінійний спряжений оператор $\bar{L}_l^* : H_T^1 \rightarrow (H_0^1)^*$. Аналогічно визначимо оператори $\bar{L}$, $\bar{L}^*$.

2. Допоміжні твердження

Лема 1. Існує деяка стала $c_B > 0$, що для довільних функцій $u \in S_0^0$, $v \in V_T^1$ і для довільної сталої $M > 0$ має місце нерівність

$$\begin{aligned}|(Bu, v)_{L_2(Q)}| \leq c_B \sum_{i=1}^n \int_Q e^{Mt} v_{x_i}^2(x, t) + \\ + e^{-Mt} \left(\int_0^t u_{x_i}(x, s) ds \right)^2 dQ.\end{aligned}\quad (9)$$

Доведення. Нехай, спочатку, u, v — гладкі функції. Інтегруючи частинами та враховуючи умови (6), (7) маємо:

$$\begin{aligned}|(Bu, v)_{L_2(Q)}| &= \left| \int_Q \int_0^t \sum_{i=1}^n K_i(t, \tau) u_{x_i}(x, \tau) d\tau v(x, t) dQ \right| = \\ &= \left| \int_Q \int_0^t \sum_{i=1}^n K_i(t, \tau) u_{x_i}(x, \tau) d\tau v_{x_i}(x, t) dQ \right| = \\ &= \left| \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \int_0^T \int_0^t K_i(t, \tau) u_{x_i}(x, \tau) d\tau v_{x_i}(x, t) dt d\Omega \right| \leq \\ &\leq \sum_{i=1}^n \left| \int_{\Omega} \int_0^T \int_0^t K_i(t, \tau) u_{x_i}(x, \tau) d\tau v_{x_i}(x, t) dt d\Omega \right|.\end{aligned}$$

Розглянемо підінтегральну функцію

$$\begin{aligned}\int_0^T \int_0^t K_i(t, \tau) u_{x_i}(x, \tau) d\tau v_{x_i}(x, t) dt = \\ = \int_0^T \int_{\tau}^T K_i(t, \tau) u_{x_i}(x, \tau) v_{x_i}(x, t) dt d\tau = \\ = \int_0^T \int_t^T K_i(\tau, t) u_{x_i}(x, t) v_{x_i}(x, \tau) d\tau dt = \\ = \int_0^T \int_t^T K_i(\tau, t) v_{x_i}(x, \tau) d\tau u_{x_i}(x, t) dt.\end{aligned}$$

Проінтегруємо частинами

$$\begin{aligned}\int_0^T \int_t^T K_i(\tau, t) v_{x_i}(x, \tau) d\tau u_{x_i}(x, t) dt = \\ = \int_t^T K_i(\tau, t) v_{x_i}(x, \tau) d\tau \int_0^t u_{x_i}(x, s) ds \Big|_0^T - \\ - \int_0^T \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_t^T K_i(\tau, t) v_{x_i}(x, \tau) d\tau \right) \int_0^t u_{x_i}(x, s) ds dt.\end{aligned}$$

Зауважимо, що

$$\begin{aligned} & \int_t^T K_i(\tau, t) v_{x_i}(x, \tau) d\tau \int_0^t u_{x_i}(x, s) ds \Big|_0^T = \\ & = \int_T^T K_i(\tau, T) v_{x_i}(x, \tau) d\tau \int_0^T u_{x_i}(x, s) ds - \\ & - \int_0^T K_i(\tau, 0) v_{x_i}(x, \tau) d\tau \int_0^0 u_{x_i}(x, s) ds = 0. \end{aligned}$$

Згідно з нерівністю Коші маємо

$$\begin{aligned} & \left| \int_{\Omega} \int_0^T \int_0^t K_i(t, \tau) u_{x_i}(x, \tau) d\tau v_{x_i}(x, t) dt d\Omega \right| = \\ & = \left| \int_{\Omega} \int_0^T \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_t^T K_i(\tau, t) v_{x_i}(x, \tau) d\tau \right) \int_0^t u_{x_i}(x, s) ds dt d\Omega \right| \leq \\ & \leq \frac{1}{2} \int_Q e^{Mt} \left(\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_t^T K_i(\tau, t) v_{x_i}(x, \tau) d\tau \right) \right)^2 dQ + \\ & + \frac{1}{2} \int_Q e^{-Mt} \left(\int_0^t u_{x_i}(x, s) ds \right)^2 dQ. \end{aligned}$$

Розглянемо перший доданок. Підінтегральна функція $K_i(\tau, t) v_{x_i}(x, \tau)$ неперервна і має неперервну частинну похідну за змінної t , тому інтеграл

$$\int_t^T K_i(\tau, t) v_{x_i}(x, \tau) d\tau$$

можна продиференціювати за параметром t .

$$\begin{aligned} & \int_Q e^{Mt} \left(\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_t^T K_i(\tau, t) v_{x_i}(x, \tau) d\tau \right) \right)^2 dQ = \\ & = \int_Q e^{Mt} \left(\int_t^T \frac{\partial K_i(\tau, t)}{\partial t} v_{x_i}(x, \tau) d\tau - K_i(t, t) v_{x_i}(x, t) \right)^2 dQ \leq \\ & \leq 2 \int_Q e^{Mt} \left(\int_t^T \frac{\partial K_i(\tau, t)}{\partial t} v_{x_i}(x, \tau) d\tau \right)^2 + \\ & + e^{Mt} \left(K_i(t, t) v_{x_i}(x, t) \right)^2 dQ \leq \\ & \leq 2 \int_Q e^{Mt} \int_t^T \left(\frac{\partial K_i(\tau, t)}{\partial t} \right)^2 d\tau \int_t^T v_{x_i}^2(x, \tau) d\tau + \\ & + e^{Mt} K_i^2(t, t) v_{x_i}^2(x, t) dQ. \end{aligned}$$

Оскільки функції $K_i(t, t), \frac{\partial K_i(\tau, t)}{\partial t}$ — неперервні на $[0, T]^2$, то вони обмежені. Нехай

$$c_K = \max \left\{ \max_{i=1..n, t \in [0, T]} K_i(t, t), \max_{i=1..n, t, \tau \in [0, T]} \frac{\partial K_i(\tau, t)}{\partial t} \right\}.$$

Таким чином

$$\begin{aligned} & 2 \int_Q e^{Mt} \int_0^T \left(\frac{\partial K_i(\tau, t)}{\partial t} \right)^2 d\tau \int_t^T v_{x_i}^2(x, \tau) d\tau + \\ & + e^{Mt} K_i^2(t, t) v_{x_i}^2(x, t) dQ \leq \\ & \leq 2 \int_Q e^{Mt} c_K^2 T \int_t^T v_{x_i}^2(x, \tau) d\tau + e^{Mt} c_K^2 v_{x_i}^2(x, t) dQ = \\ & = 2 c_K^2 T \int_Q \int_t^T e^{Mt} v_{x_i}^2(x, \tau) d\tau dQ + 2 c_K^2 \int_Q e^{Mt} v_{x_i}^2(x, t) dQ. \end{aligned}$$

Зауважимо, що

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_t^T e^{Mt} v_{x_i}^2(x, \tau) d\tau dt = \int_0^T \int_0^\tau e^{Mt} v_{x_i}^2(x, \tau) dt d\tau = \\ & = \int_0^T v_{x_i}^2(x, \tau) \int_0^\tau e^{Mt} dt d\tau = \\ & = \int_0^T v_{x_i}^2(x, \tau) \frac{1}{M} e^{M\tau} \Big|_0^\tau d\tau = \int_0^T v_{x_i}^2(x, \tau) \frac{e^{M\tau} - 1}{M} d\tau \leq \\ & \leq \frac{1}{M} \int_0^T e^{M\tau} v_{x_i}^2(x, \tau) d\tau. \end{aligned}$$

Отже,

$$\begin{aligned} & 2 c_K^2 T \int_Q \int_t^T e^{Mt} v_{x_i}^2(x, \tau) d\tau dQ + 2 c_K^2 \int_Q e^{Mt} v_{x_i}^2(x, t) dQ \leq \\ & \leq \frac{2 c_K^2 T}{M} \int_Q e^{Mt} v_{x_i}^2(x, t) dQ + 2 c_K^2 \int_Q e^{Mt} v_{x_i}^2(x, t) dQ = \\ & = 2 c_K^2 \left(\frac{T}{M} + 1 \right) \int_Q e^{Mt} v_{x_i}^2(x, t) dQ. \end{aligned}$$

Підсумовуючи зазначене вище, отримаємо

$$\begin{aligned} & |(Bu, v)_{L_2(Q)}| \leq \sum_{i=1}^n c_K^2 \left(\frac{T}{M} + 1 \right) \int_Q e^{Mt} v_{x_i}^2(x, t) dQ + \\ & + \frac{1}{2} \int_Q e^{-Mt} \left(\int_0^t u_{x_i}(x, s) ds \right)^2 dQ. \end{aligned}$$

Для довільних функцій $u \in S_0^0, v \in V_T^1$ нерівність (14) отримуємо граничним переходом. $\square$

3. Априорні оцінки

Теорема 1. Існує така стала $c > 0$, що для

довільної функції $u \in H_0^1$ має місце нерівність

$$\|\bar{L}_I u\|_{(H_T^1)^*} \leq c \|u\|_{H_0^1},$$

Доведення. Нехай u, v — гладкі функції. Застосовуючи нерівність Коші-Буняковського, отримуємо

$$\begin{aligned} |(Bu, v)_{L_2(Q)}| &\leq \sum_{i=1}^n \left| \int_Q \int_0^t K_i(t, \tau) u_{x_i}(x, \tau) d\tau v_{x_i}(x, t) dQ \right| \leq \\ &\leq \sum_{i=1}^n \left(\int_Q \left(\int_0^t K_i(t, \tau) u_{x_i}(x, \tau) d\tau \right)^2 dQ \int_Q v_{x_i}^2(x, t) dQ \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ &\leq \sum_{i=1}^n \left(\int_Q \int_0^t K_i^2(t, \tau) d\tau \int_0^t u_{x_i}^2(x, \tau) d\tau dQ \int_Q v_{x_i}^2(x, t) dQ \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ &\leq \sum_{i=1}^n \left(\int_Q T c_K^2 \int_0^T u_{x_i}^2(x, \tau) d\tau dQ \int_Q v_{x_i}^2(x, t) dQ \right)^{\frac{1}{2}} = \\ &\leq \sum_{i=1}^n \left(\int_Q T^2 c_K^2 u_{x_i}^2(x, t) dQ \int_Q v_{x_i}^2(x, t) dQ \right)^{\frac{1}{2}} \leq c \|u\|_{H_0^1} \|v\|_{H_T^1}. \end{aligned}$$

Таким чином

$$\frac{|(Bu, v)_{L_2(Q)}|}{\|v\|_{H_T^1}} \leq c \|u\|_{H_0^1}.$$

Переходячи до супремуму за гладкими функціями v та зважаючи на щільність останніх в просторі H_T^1 , отримаємо

$$\|Bu\|_{(H_T^1)^*} \leq c \|u\|_{H_0^1}.$$

З допомогою граничного переходу отримуємо, що остання нерівність справедлива для всіх функцій $u \in H_0^1$.

У роботі [6] доведено, що для диференціальної частини оператора L має місце нерівність

$$\|\bar{L}u\|_{(H_T^1)^*} \leq c \|u\|_{H_0^1}.$$

З двох останніх нерівностей випливає справедливість теореми. $\square$

Теорема 2. Існує така стала $c > 0$, що для довільної функції $u \in H_0^1$ має місце нерівність

$$c^{-1} \|u\|_{S_0^0} \leq \|\bar{L}_I u\|_{(V_T^1)^*}. \quad (10)$$

Доведення. Для доведення нерівності (10)

розглянемо значення функціоналу $\bar{L}_I u \in (H_T^1)^* \subset (V_T^1)^*$ на елементі $v(t, x)$, де $v(t, x)$ — розв'язок задачі Коші

$$e^{Mt} (-v_t + v) = u(t, x), \quad v|_{t=T} = 0.$$

У роботі [6] доведено, що для довільного $d > 0$ можна підібрати сталу M таким чином, щоб для диференціальної частини $\bar{L}$ оператора $\bar{L}_I$ мала місце нерівність

$$\begin{aligned} \langle \bar{L}u, v \rangle_{V_T^1} &\geq d \int_Q e^{Mt} v_t^2 dQ + d \int_Q e^{Mt} v^2 dQ + \\ &+ d \int_Q e^{-Mt} u^2 dQ + \frac{1}{4} \int_\Omega e^{-MT} u^2|_{t=T} d\Omega + \\ &+ \frac{\alpha}{8} \sum_{i=1}^n \int_\Omega v_{x_i}^2|_{t=0} d\Omega + d \sum_{i=1}^n \int_Q e^{Mt} v_{x_i}^2 dQ + \\ &+ \frac{\alpha}{4} \sum_{i=1}^n \int_\Omega e^{-MT} \bar{u}_{x_i}^2|_{t=T} d\Omega + d \sum_{i=1}^n \int_Q e^{-Mt} \bar{u}_{x_i}^2 dQ, \end{aligned}$$

$$\text{де } \bar{u}(t, x) = \int_0^t u(\tau, x) d\tau.$$

Зважаючи на лему 1, маємо, що

$$|(Bu, v)_{L_2(Q)}| \leq c_B \sum_{i=1}^n \int_Q e^{Mt} v_{x_i}^2 + e^{-Mt} \bar{u}_{x_i}^2 dQ.$$

Тому, обираючи $d > c_B$, маємо, що для деякої сталої $c > 0$ виконується нерівність

$$\begin{aligned} \langle \bar{L}_I u, v \rangle_{V_T^1} &\geq \langle \bar{L}u, v \rangle_{V_T^1} - |\langle Bu, v \rangle_{V_T^1}| \geq \\ &\geq c^{-1} (\|u\|_{S_0^0}^2 + \|v\|_{V_T^1}^2). \end{aligned}$$

Застосовуючи до лівої частини нерівність Шварца, а до правої нерівність Коші, дістаємо

$$\|\bar{L}_I u\|_{(V_T^1)^*} \|v\|_{V_T^1} \geq \langle \bar{L}_I u, v \rangle_{V_T^1} \geq 2c^{-1} \|u\|_{S_0^0} \|v\|_{V_T^1}.$$

Звідки і випливає твердження теореми. $\square$

Наслідок 1. Таким чином, доведено, що для всіх $u \in H_0^1$ мають місце нерівності

$$\|u\|_{S_0^0} \leq c_1 \|\bar{L}_I u\|_{(V_T^1)^*} \leq c_2 \|\bar{L}_I u\|_{(H_T^1)^*} \leq c_3 \|u\|_{H_0^1}.$$

Теорема 3. Для всіх $v \in H_T^1$ мають місце нерівності

$$\|u\|_{S_T^0} \leq c_1 \|\bar{L}_T u\|_{(V_T^1)^*} \leq c_2 \|\bar{L}_T u\|_{(H_0^1)^*} \leq c_3 \|u\|_{H_T^1} .$$

при $i \rightarrow \infty$.

Доведення. Аналогічно доведенню теорем 1,2.

4. Узагальнена розв'язність

Зважаючи на отримані нерівності, використовуючи метод апіорних оцінок в негативних нормах [4],[5] та аналогічно роботі [6] можна довести такі теореми

Теорема 4. Для довільних $f \in (V_T^1)^* \subset (H_T^1)^*$ існує єдиний розв'язок $u \in V_0^1$ рівняння $\bar{L}_T u = f$.

Означення. Узагальненим розв'язком рівняння $\bar{L}_T u = f$ будемо називати елемент $u \in S_0^0$, для якого існує послідовність $u_i \in L_0$, що

$$\|u_i - u\|_{S_0^0} \rightarrow 0, \quad \|\bar{L}_T u_i - f\|_{(V_T^1)^*} \rightarrow 0$$

Список використаних джерел

1. Duvant G., Lions J. L. Inequalities in Mechanics and Physics. – Springer, 1976. – 397 p.
2. Falaleev M.V., Orlov S.S. Integro-differential equations with degeneration in banach spaces and it's applications in mathematical theory of elasticit // News of Irkutsk State University, Series «Mathematics», 2011. - №1. - P.118-134 (in Russian).
3. Sveshnikov A.G., Alshin A.B., Korpusov M.O., Pletner Ju.D. Linear and non-linear equations of Sobolev type. – Moscow.: Fizmatlit, 2007. – 734 p. (in Russian).
4. Lyashko S. I. Generalized optimal control of linear systems with distributed parameters. - Boston / Dordrecht / London: Kluwer Academic Publishers, 2002. – 466 p.

Теорема 5. Для всіх $f \in (V_T^1)^*$ існує єдиний узагальнений розв'язок $u \in S_0^0$ рівняння $\bar{L}_T u = f$.

Теорема 6. Існує така стала $c_1 > 0$, що для всіх елементів $f \in (V_T^1)^*$ має місце нерівність $\|u\|_{S_0^0} \leq c_1 \|f\|_{(V_T^1)^*}$, де $u \in S_0^0$ — узагальнений розв'язок рівняння $\bar{L}_T u = f$.

Зауваження 2. Враховуючи отримані апіорні нерівності, аналогічно до роботи [6], можна сформулювати теореми про керованість та асимптотичну керованість системами, що описуються інтегро-диференціальними рівняннями гіперболічного типу.

5. Lyashko S.I., Nomirovskii D.A., Petunin Ju.I., Semenov V.V. Twentieh Hilbert problem. Generalized solutions of operator equations. – Dealektika, 2009. – 192 p. (in Russian).
6. Anikushyn A.V., Nomirovskii D.A. Trajectory and final controllability of hyperbolic system for some classes of distributions. – Visn., Ser. Fiz.-Mat. Nayky, Kyiv Univ. im. Tarasa Shevchenka. – 2008. – N 3. – P. 119-124 (in Ukrainian).
7. Anikushyn A.V. Generalized solvability of linear elliptic-like integro-differential equation // – Visn., Ser. Fiz.-Mat. Nayky, Kyiv Univ. im. Tarasa Shevchenka. – 2010. – N 3. – P. 163-168 (in Ukrainian).
8. Anikushyn A.V. Optimal control of integro-differential systems of parabolic type // Journ. of comp. and appl. math., 2010. — №3. — P. 3–16. (in Ukrainian).

Надійшла до редколегії 30.08.13

УДК 517.929.4

Гаркуша Н.І., к. е. н., с.н.с.

Динаміка моделі Гудвіна з післядією

Розглянуто математичні моделі динаміки взаємовідношень підприємця-службовця Гудвіна. Наведено класичну модель, далі розглянуто модель з запізнюванням. Проведено дослідження стану рівноваги системи з післядією.

Ключові слова: математична модель, динамічна система, диференціальні рівняння, запізнювання, стійкість.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: ngarkusha@gmail.com

Статтю представив д.ф.-м.н, проф. Хусаїнов Д. Я.

Вступ

Запропонована робота є продовженням дослідження математичної моделі Гудвіна, яка була опублікована в статті [1]. В цій роботі описана взаємодія виробничих прошарків у суспільстві [2]. Розглядалися два суспільних прошарки: службовці та підприємці. Їх взаємовідносини описані системою двох диференціальних рівнянь

$$\dot{x}(t) = \left[\frac{1-y(t)}{k} - (g+n) \right] x(t),$$

$$\dot{y}(t) = \left[\frac{dw/dt}{w} - \frac{da/dt}{a} \right].$$

Лінійна апроксимація $w^{-1} dw/dt = -r + bx$ у другому рівнянні, приводить до співвідношення $y^{-1} dy/dt = -r + bx - g$. І модель Гудвіна взаємодії двох суспільних прошарків, має наступний вигляд

$$\dot{x}(t) = \left[\frac{1}{k} - (g+n) - \frac{y(t)}{k} \right] x(t),$$

$$\dot{y}(t) = [-(g+r) + bx(t)]y(t).$$

Дослідження динаміки системи Гудвіна з післядією.

Якщо враховувати час τ прийняття рішень (час після отримання інформації і прийняття рішення), то більш адекватною математичною моделлю є модель з післядією. Вона має вигляд

Garkusha N.I., PhD

The dynamics of model Goodwin with delay

The mathematical model of the dynamics of relationships entrepreneur-agent Goodwin. First are the classic model. Next, consider a model with a delay. A study of equilibrium system with aftereffect.

Key words: mathematical model, dynamic system, differential equations, delay, stability.

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: ngarkusha@gmail.com

$$\dot{x}(t) = \left[\frac{1}{k} - (g+n) - \frac{y(t-\tau)}{k} \right] x(t),$$

$$\dot{y}(t) = [-(g+r) + bx(t-\tau)]y(t). \quad (1)$$

Стани рівноваги цієї системи ті ж самі, що і в системі без післядії. Ними є дві точки спокою $M_0(x^0, y^0)$, $x^0 = 0$, $y^0 = 0$ і $M^*(x^*, y^*)$, $x^* = (g+r)/b$, $y^* = 1 - k(g+n)$. Нехай виконується умова

$$1 - k(g+n) > 0. \quad (2)$$

Тоді друга особлива точка знаходиться в додатній чверті. Заміною змінних

$$x(t) = (g+r)/b + \xi(t), \quad y(t) = 1 - k(g+n) + \eta(t) \quad (3)$$

система (1) зводиться до вигляду «системи рівнянь збурень» у другій особливій точці. Вона буде мати вигляд

$$\dot{\xi}(t) = -\frac{1}{k} \left[\frac{g+r}{b} + \xi(t) \right] \eta(t-\tau),$$

$$\dot{\eta}(t) = b[1 + k(g+n) + \eta(t)]\xi(t-\tau). \quad (4)$$

Проведемо дослідження стійкості другої з особливих точок $M^*(x^*, y^*)$. Система лінійного наближення для особливої точки $M^*(x^*, y^*)$ має вигляд

$$\dot{\xi}(t) = -\frac{g+r}{kb} \eta(t-\tau),$$

$$\dot{\eta}(t) = b[1 + k(g + n)]\xi(t - \tau).$$

Її характеристичним рівнянням буде

$$\lambda^2 + \frac{1}{k}(g + r)[1 + k(g + n)]e^{-2\lambda\tau} = 0.$$

Позначивши

$$\frac{1}{k}(g + r)[1 + k(g + n)] = \omega^2,$$

отримаємо, що рівняння має вигляд

$$\lambda^2 + \omega^2 e^{-2\lambda\tau} = 0. \quad (5)$$

Його можна записати, як добуток

$$(\lambda + i\omega e^{-\lambda\tau})(\lambda - i\omega e^{-\lambda\tau}) = 0$$

і розщепити на два окремих

$$\lambda + i\omega e^{-\lambda\tau} = 0, \quad \lambda - i\omega e^{-\lambda\tau} = 0.$$

В роботі [1] отримані наступні результати.

1. Рівняння (5) має злічену кількість коренів.

2. Якщо виконується умова $\omega = (-1)^k k\pi$, $k = \pm 1, \pm 2, \dots$, то рівняння (5) має розв'язок $\lambda_0 = i k\pi/\tau$.

3. Існує хоча б один корінь з додатною дійсною частиною тобто $\lambda_0 = x_0 + iy_0$, $x_0 > 0$.

Таким чином модель Гудвіна має нестійкий ненульовий стан рівноваги.

Далі, розглянута модель, яка враховує взаємний вплив. Вона має вигляд

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= \left[\frac{1}{k} - (g + n) + R_1 x(t - \tau) - \frac{y(t - \tau)}{k} \right] x(t), \\ \dot{y}(t) &= [-(g + r) + bx(t - \tau) + R_2 y(t - \tau)] y(t). \end{aligned} \quad (6)$$

В цій моделі сталі R_1 , R_2 враховують взаємний вплив змінних. Система має вже чотири особливі точки:

$$O_1(x_1, y_1), \quad x_1 = 0, \quad y_1 = 0,$$

$$O_2(x_2, y_2), \quad x_2 = 0, \quad y_2 = \frac{g + r}{R_1 k},$$

$$O_3(x_3, y_3), \quad x_3 = \frac{1 - (g + n)}{R_1 k}, \quad y_3 = 0,$$

$$O_4(x_4, y_4), \quad x_4 = \frac{R_2 \left[\frac{1}{k} - (g + n) \right] + \frac{1}{k}(g + r)}{R_1 R_2 + \frac{b}{k}},$$

$$y_4 = \frac{R_1(g + r) - b \left[\frac{1}{k} - (g + n) \right]}{R_1 R_2 + \frac{b}{k}}. \quad (7)$$

Інтерес являє стан рівноваги $O_4(x_4, y_4)$. При виконанні умов

$$\begin{aligned} R_1(g + r) &> b \left[\frac{1}{k} - (g + n) \right], \\ (g + r) &> R_2[k(g + n) - 1] \end{aligned}$$

точка $O_4(x_4, y_4)$ буде знаходитися в першому квадранті. Лінеаризація нелінійної системи (6) в околі цієї точки дає наступну систему:

$$\dot{z}(t) = Az(t) + Bz(t - \tau), \quad (8)$$

де

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 \\ 0 & a_{22} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}, \quad z(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix},$$

$$a_{11} = \left[\frac{1}{k} - (g + n) + R_1 x_4 - \frac{1}{k} y_4 \right],$$

$$a_{22} = [-(g + r) + bx_4 + R_2 y_4] \quad (9)$$

$$b_{11} = R_1 x_4, \quad b_{12} = -\frac{1}{k} x_4, \quad b_{21} = y_4, \quad b_{22} = R_2 y_4.$$

Відомо, що необхідною умовою стійкості лінійної стаціонарної системи з запізнюванням є асимптотична стійкість відповідної системи без запізнювання [3, 4]. Характеристичне рівняння системи без запізнювання

$$\dot{x}(t) = (A + B)x(t)$$

має вигляд

$$\det \begin{vmatrix} a_{11} + b_{11} - \lambda & b_{12} \\ b_{21} & a_{22} + b_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

або

$$\begin{aligned} \lambda^2 - [(a_{11} + a_{22}) + (b_{11} + b_{22})]\lambda + \\ + [(a_{11} + b_{11})(a_{22} + b_{22}) - b_{12}b_{21}] = 0. \end{aligned}$$

Для рівняння другого порядку необхідною і достатньою умовою від'ємності дійсних

частин коренів характеристичного рівняння є позитивні коефіцієнти, тобто

$$(a_{11} + a_{22}) + (b_{11} + b_{22}) > 0, \\ (a_{11} + b_{11})(a_{22} + b_{22}) - b_{12}b_{21} > 0. \quad (10)$$

Звідси, якщо виконується нерівність (10) з параметрами, визначеними в (9), то стан рівноваги буде асимптотично стійким.

Це означає, що встановлюється динамічна рівновага у взаємовідносинах між підприємцями і службовцями. В даній роботі проведена оцінка залежності коефіцієнтів взаємного впливу R_1 і R_2 , а також запізнювання $\tau > 0$ на стійкість стану рівноваги $O_4(x_4, y_4)$. Для дослідження будемо використовувати другий метод Ляпунова. Як відомо [3, 4], другий метод Ляпунова для систем з післядією використовується у двох напрямках: метод скінченновимірних функцій з умовою Разуміхіна і метод функціоналів Ляпунова-Красовського. Кожен з цих методів має свої сильні та слабкі сторони.

Будемо використовувати метод функцій Ляпунова квадратичного вигляду

$$V(z) = z^T H z, \quad H = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{12} & h_{22} \end{bmatrix}, \\ h_{11} > 0, \quad h_{11}h_{22} - h_{12}^2 > 0. \quad (11)$$

Повна похідна квадратичної функції Ляпунова в силу системи (8) має вигляд

$$\frac{d}{dt}V(z(t)) = \dot{z}^T(t)Hz(t) + z^T(t)H\dot{z}(t) = \\ = [Az(t) + Bz(t-\tau)]Hz(t) + \\ + z^T(t)H[Az(t) + Bz(t-\tau)]$$

Або

$$\frac{d}{dt}V(z(t)) = z^T(t)[(A+B)^T H + H(A+B)]z(t) + \\ + 2z^T(t)HB[z(t-\tau) - z(t)]. \quad (12)$$

Загальна ідеологія доведення теорем про стійкість за допомогою функцій Ляпунова складається в наступному. Нехай початкові умови знаходяться в досить малому δ -околі U_δ нульового стану рівноваги. Розглядається розв'язок, який починається в цьому околі. Цей окіл розташований всередині області

$$V^\alpha = \{x \in R^n : V(x) < \alpha\},$$

яка знаходиться всередині ε -околу U_ε стану рівноваги. Нехай, від супротивного, розв'язок виходить з ε -околу. Але тоді перша точка виходу повинна перетнути поверхню рівня функції Ляпунова

$$\partial V^\alpha = \{x \in R^n : V(x) = \alpha\}.$$

А це неможливо, оскільки повна похідна функції Ляпунова від'ємно визначена, що еквівалентно тому, що векторне поле системи направлено всередину поверхні рівня.

Умова Разуміхіна стосовно до системи з (8) означає, що повна похідна (12) обчислюється при виконанні умови

$$\lambda_{\min}(H)\|z(t-\tau)\|^2 \leq V(z(t-\tau)) < V(z(t)) \leq \\ \leq \lambda_{\max}(H)\|z(t)\|^2, \quad t > 0.$$

Або

$$\|z(t-\tau)\| < \sqrt{\varphi(H)}\|z(t)\|, \quad \varphi(H) = \frac{\lambda_{\max}(H)}{\lambda_{\min}(H)}, \quad (13)$$

$\lambda_{\min}(H)$, $\lambda_{\max}(H)$ – екстремальні власні числа симетричної позитивно визначеної матриці H , під векторною та матричною нормами розуміються наступні

$$\|z(t)\| = \{x^2(t) + y^2(t)\}^{1/2}, \quad |A| = \{\lambda_{\max}(A^T A)\}^{1/2}.$$

Нехай виконуються необхідні умови стійкості і матриця $A+B$ асимптотично стійка. Тоді при довільній позитивно визначеній матриці C матричне рівняння Ляпунова

$$(A+B)^T H + H(A+B) = -C \quad (14)$$

має єдиний розв'язок – позитивно визначену матрицю H [5]. І для повної похідної функції Ляпунова (12) можна провести наступну оцінку

$$\frac{d}{dt}V(z(t)) \leq -\lambda_{\min}(C)\|z(t)\|^2 + 2\|HB\|[\|z(t)\| + \|z(t-\tau)\|] \leq \\ \leq -\left\{\lambda_{\min}(C) - 2\|HB\|\left[1 + \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(H)}{\lambda_{\min}(H)}}\right]\right\}\|z(t)\|^2.$$

Таким чином, якщо знайдеться позитивно визначена матриця H , при якій буде виконуватись нерівність

$$\lambda_{\min}(C) - 2|HB| [1 + \sqrt{\varphi(H)}] > 0, \quad (15)$$

то стан рівноваги буде асимптотично стійким рівномірно (тобто незалежно) за $\tau > 0$.

Умову (15) можна інтерпретувати наступним чином. Якщо «основна» матриця A є «сильно стійкою», а матриця запізнювань B в якомусь сенсі «малою», то запізнювання на динаміку системи впливу не має.

Використовуємо викладені умови стійкості стосовно до системи Гудвіна (6), лінеаризованої в точці $O_4(x_4, y_4)$. Матричне рівняння Ляпунова (14) має вигляд

$$\begin{aligned} 2[(a_{11} + b_{11})h_{11} + b_{21}h_{12}] &= -c_{11} \\ b_{12}h_{11} + [(a_{11} + a_{22}) + (b_{11} + b_{22})]h_{12} + b_{21}h_{22} &= -c_{12} \\ 2[b_{12}h_{12} + (a_{22} + b_{22})h_{22}] &= -c_{22}, \end{aligned} \quad (16)$$

Його розв'язками будуть

$$h_{11} = \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad h_{12} = \frac{\Delta_2}{\Delta}, \quad h_{22} = \frac{\Delta_3}{\Delta},$$

де

$$\begin{aligned} \Delta &= \begin{vmatrix} (a_{11} + b_{11}) & b_{21} & 0 \\ b_{12} & (a_{11} + b_{11}) + (a_{22} + b_{22}) & b_{21} \\ 0 & b_{12} & (a_{22} + b_{22}) \end{vmatrix} \\ \Delta_1 &= \begin{vmatrix} -c_{11}/2 & b_{21} & 0 \\ -c_{12} & (a_{11} + b_{11}) + (a_{22} + b_{22}) & b_{21} \\ -c_{22}/2 & b_{12} & (a_{22} + b_{22}) \end{vmatrix} \\ \Delta_2 &= \begin{vmatrix} (a_{11} + b_{11}) & -c_{11}/2 & 0 \\ b_{12} & -c_{12} & b_{21} \\ 0 & -c_{22}/2 & (a_{22} + b_{22}) \end{vmatrix}, \\ \Delta_3 &= \begin{vmatrix} (a_{11} + b_{11}) & b_{21} & -c_{11}/2 \\ b_{12} & (a_{11} + b_{11}) + (a_{22} + b_{22}) & -c_{12} \\ 0 & b_{12} & -c_{22}/2 \end{vmatrix} \end{aligned}$$

Поклавши (для простоти) $c_{11} = c_{22} = 2c > 0$, $c_{12} = 0$, отримаємо

$$\begin{aligned} \Delta &= [(a_{11} + b_{11})(a_{22} + b_{22})][a_{11}a_{22} + a_{11}b_{11} + a_{22}b_{11}] \\ \Delta_1 &= -c(a_{22} + b_{22})[(a_{11} + b_{11}) + (a_{22} + b_{22}) - b_{21}], \\ \Delta_2 &= c(a_{11} + b_{11})(b_{12} + b_{21}), \\ \Delta_3 &= -c(a_{11} + b_{11})[(a_{11} + b_{11}) + (a_{22} + b_{22}) - b_{12}]. \end{aligned} \quad (17)$$

Оскільки при вибраній матриці C для

симетричних матриць H і C власні числа мають вигляд

$$\begin{aligned} \lambda_{\max}(H) &= \frac{1}{2} \left\{ (h_{11} + h_{22}) + \sqrt{(h_{11} - h_{12})^2 + 4h_{12}^2} \right\}, \\ \lambda_{\min}(H) &= \frac{1}{2} \left\{ (h_{11} + h_{22}) - \sqrt{(h_{11} - h_{12})^2 + 4h_{12}^2} \right\}, \\ \lambda_{\min}(C) &= 2c, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} |HB| &\leq |H||B| = \lambda_{\max}(H)|B|, \\ |B| &= (b_{11}^2 + b_{12}^2 + b_{21}^2 + b_{22}^2)^{1/2}, \end{aligned} \quad (19)$$

то при виконанні нерівності

$$c - \lambda_{\max}(H)|B| \left[1 + \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(H)}{\lambda_{\min}(H)}} \right] > 0, \quad (20)$$

де величини $\lambda_{\max}(H)$, $\lambda_{\min}(H)$, $|B|$ визначені в (18), (19), стан рівноваги $O_4(x_4, y_4)$ лінеаризованої системи (8) з параметрами, визначеними в (10) і функцією Ляпунова (11) з коефіцієнтами, визначеними в (16), (17), буде асимптотично стійким при довільному запізнюванні $\tau > 0$.

Зауваження. Як випливає з теореми про стійкість за лінійним наближенням, асимптотично стійким буде і стан рівноваги $O_4(x_4, y_4)$ вихідної нелінійної системи (6). Але тут виникає питання про оцінку області стійкості. Оцінку області стійкості можна отримати за допомогою запропонованої функції Ляпунова.

Список використаної літератури

1. Garkusha N.I. The proximity of Models of the Dynamics of Voltaire and Goodwin // Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics & Mathematics, -2013. -№2.- P.131-134. (in Ukrainian).
2. Zang V.V. Synergetic Economics. Time and changes in the nonlinear economic theory. M.: Mir, 1999. - 335 p. (in Russian).
3. Elsgoltz L. E., Norkin S.B. Introduction to the Theory of Differential Equations with Deviating Argument. M: Nauka, 1970. - 240 p. (in Russian).
4. Heil J. The Theory of Functional Differential Equations. M.: Mir, 1984. - 421 p. (in Russian).
5. Barbashin E.A. The Method of Lyapunov's functions. M.: Nauka, 1970. - 240 p. (in Russian).

Подано до редколегії 20.05.2013

УДК 004.932.751

Голік А.О.¹, аспірант А.О.

Стандартизація геометричних характеристик в задачі розпізнавання дактильної мови жестів

Наведений спосіб отримання геометричних характеристик, зокрема дефектів, для продемонстрованого перед веб-камерою знаку дактильної мови жестів. Запропонований варіант представлення структури дефекту у стандартизованій формі.

Ключові слова: розпізнавання жестів, дефекти, стандартизація, нормалізація, дактильна мова жестів.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т Глушкова 4д, e-mail: analytical@ukr.net

A.O. Golik¹, post-graduate student A.O.

Standardization of geometrical characteristics in gesture recognition

Approach to obtaining geometrical characteristics, in particular defects, for gesture shown in front of web camera is given. Variant of standardization of defect's structure is suggested.

Key Words: gesture recognition, defects, standardization, normalization, tactile sign language.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova av., 4d, e-mail: analytical@ukr.net

Статтю представив д.т.н., проф. Акіменко В.В.

Розпізнавання знаків дактильної мови жестів є важливою прикладною задачею. В першу чергу це пояснюється тим що є люди, для яких такі системи розпізнавання є життєвою необхідністю, зокрема глухі та глухонімі люди. У випадку, коли людина втратила слух у зрілому віці, зазвичай вона здатна продовжити повноцінне життя, але у значно складнішому становищі опиняються діти, які глухі з народження чи з малого віку. Розвиток таких дітей є важливою соціальною проблемою, яка на жаль досі сповна не вирішена. Звісно, наявність коштів на слухові апарати та інше обладнання частково її вирішує, проте мало забезпечена частина населення, діти в дитячих будинках, залишаються без підтримки. Тому створення системи розпізнавання знаків дактильної мови жестів, яка б не потребувала додаткових пристроїв зчитування та сенсорів, була доступною для більшості людей, які її потребують є актуальною задачею.[1]

В запропонованій статті наведений принцип виділення контуру долоні на захопленому записуючим пристроєм зображенні. Розглянуті геометричні характеристики контуру долоні, які несуть в собі інформативну цінність та можуть бути ефективно використані при розпізнаванні жестів, зокрема дефекти. Запропонований варіант

представлення структури дефекту у стандартизованій формі.

Виділення на зображенні контуру долоні

Більшість способів пошуку долоні на зображенні пов'язані з аналізом кольору пікселів. Зазвичай використовуються два формати представлення кольору – RGB та HSV. Перший визначає колір, як комбінацію червоного (red), зеленого (green) то синього (blue), а другий – пропонує розклад на компоненти: тон (hue), насиченість (saturation) та яскравість (value). Обидва формати мають свої недоліки та переваги, проте у задачах розпізнавання об'єктів на зображеннях (особливо коли мова йде про міміку чи жести людини) зазвичай використовують HSV представлення. Цей формат дозволяє розглядати тон як окрему складову, що актуально у випадку, коли пошук контуру долоні на зображенні здійснюється шляхом визначення ділянок, які відповідають кольору шкіри людини. Загалом алгоритм виділення контуру долоні на зображенні за кольором шкіри складається із двох базових кроків. На першому – за значеннями HSV компонент пікселів виділяють ділянки

зображення, які відповідають кольору шкіри людини. На другому – відбувається згладжування та фільтрація, що дозволяє позбутися шумів та пошук серед отриманих ділянок тієї, яка відповідає долоні. Це не тривіальна задача, адже умови середовища – освітлення, фон тощо,

мають безпосередній вплив на результати розпізнавання, тому існуючі системи вимагають наявності певного фону, чи налаштування системи під умови конкретного середовища. Ця проблема частково долається шляхом використання однотонної рукавички.

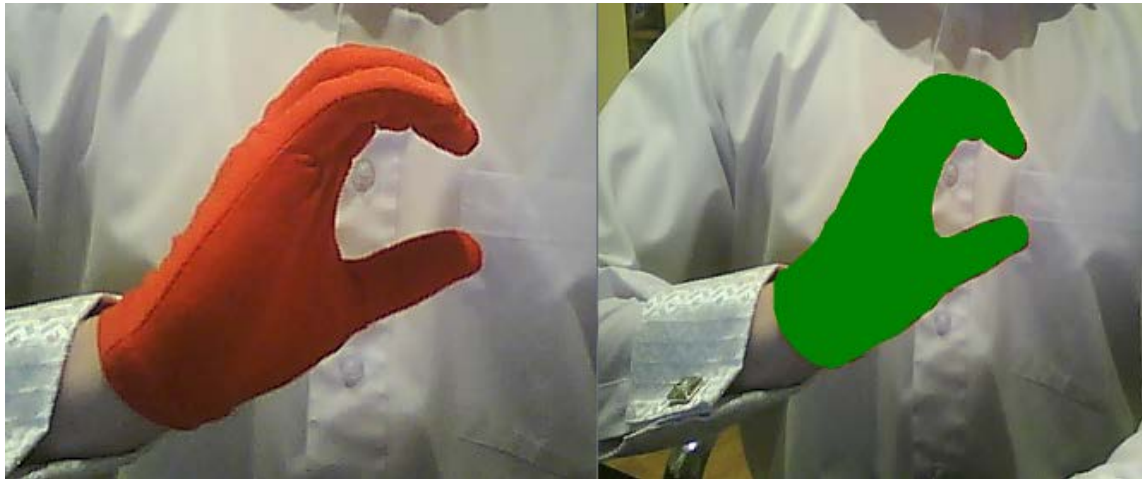


Рисунок 1. Ілюстрація виділення контуру долоні на зображенні.

Щодо практичної реалізації, то найбільш функціональною та доступною є бібліотека OpenCV. Вона написана на C++, проте розроблено ряд оболонок, які дозволяють використати її можливості практично у будь-якому середовищі програмування, наприклад Java (JavaCV) або C# (EmguCV). Наявні в даній бібліотеці інструменти для аналізу зображення, його обробки та згладжування, пошуку контурів

тощо дозволяють досягти дуже високої якості пошуку контуру долоні на зображенні.[1]

Опукла оболонка та дефекти контуру долоні

Інформація про виділену частину зображення представляється спеціальним чином: у вигляді замкненого контуру, що представляє формалізований опис «захопленого» об'єкту.

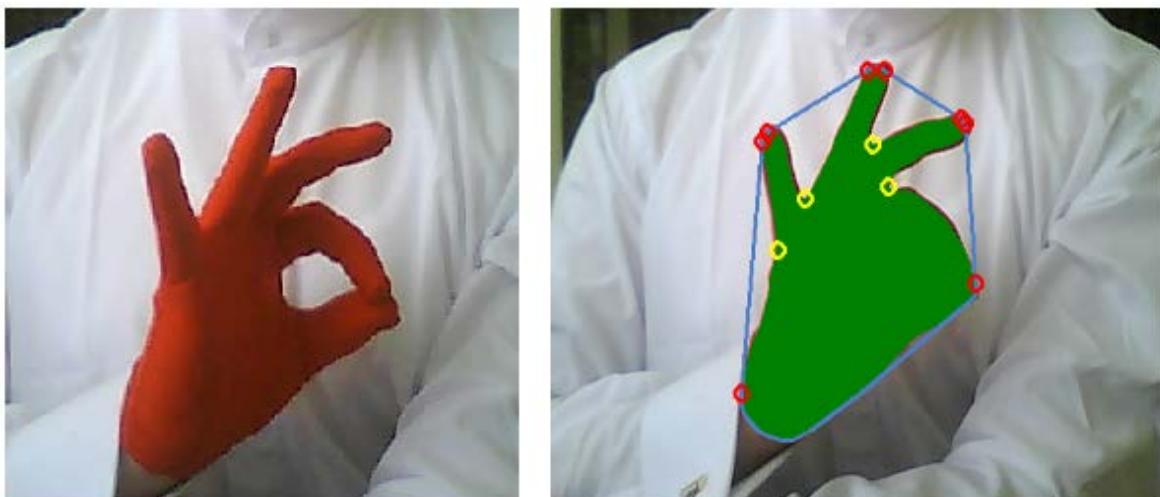


Рисунок 2. Виділення на зображенні контуру долоні, опуклої оболонки та дефектів.

Зокрема, це стосується такої важливої для розпізнавання інформації, як та що міститься в так званих «дефектах». Під дефектами зображення контуру долоні матимемо на увазі

геометричні характеристики, що дозволяють ідентифікувати дактильний символ. Згадані дефекти характеризують взаємне

розташування контуру долоні та його опуклої оболонки.

Так, на рисунку 2 дефекти представлені «криволінійними трикутниками» з (синіми) ділянками ламаної опуклої оболонки контуру як основами.

Оскільки дефекти визначаються взаємним розташуванням контуру долоні та його опуклої оболонки, то наступним кроком обробки зображення з метою розпізнавання є побудова опуклої оболонки контуру. На рисунку 2 проілюстрований результат роботи програми з виділення контуру долоні та побудови відповідної йому опуклої оболонки.

Цей рисунок представляє чотири дефекти, для яких кружечками виділені початок, кінець (червоні) та найглибша точка (жовта). Насправді рисунок ілюструє тільки значущі дефекти: ті, що можуть бути помітними на зображенні та, відповідно, використані для розпізнавання. Тому важливою частиною алгоритму розпізнавання є сортування

дефектів на «значущі» та «незначущі». Критеріями значущості можуть виступати, наприклад, значення довжини та глибини дефекту, відношення довжини до глибини та деякі інші.[1,2]

Представлення структури дефекту у стандартизованій формі

Для дефекту можна обчислити ряд числових характеристик: довжина, висота, площа, периметр та інші. У програмно реалізованій системі розпізнавання своєю ефективністю показали відносні величини обчислені на базі вищезгаданих числових характеристик. Проте, особливої уваги заслуговує опис структури дефекту. В статті пропонується підхід до формування векторів ознак, які максимально адекватно відображали б структуру дефекту, тобто положення точок контуру, які потрапили в межі дефекту.

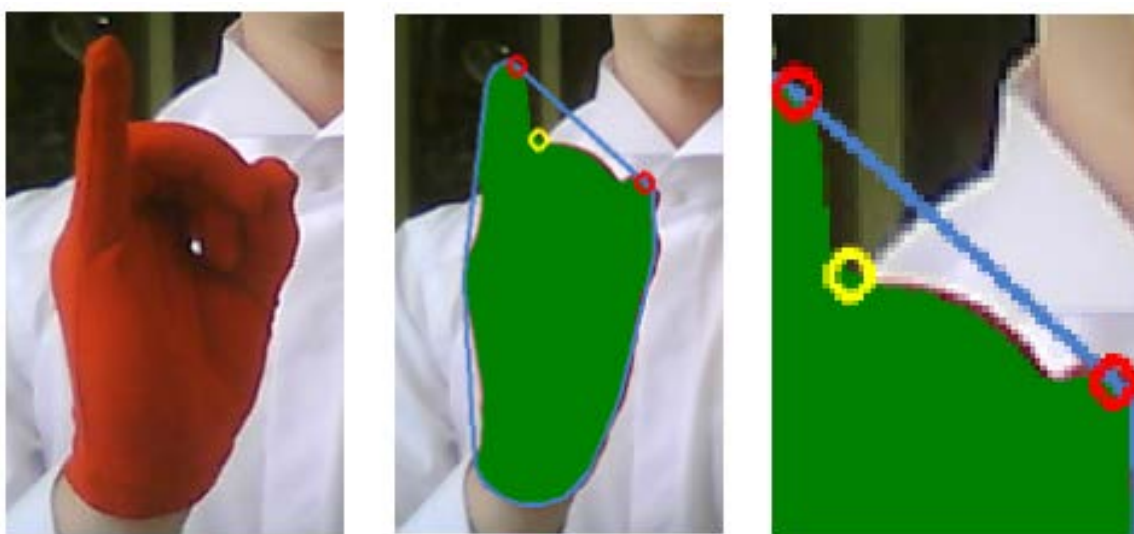


Рисунок 3. Ілюстрація дефекту для дактильної літери «і».

На рисунку 3 зображений жест, для якого знайдений один значущий дефект, виділені початкова, кінцева та найглибша точки. Проте, на даному етапі не використана інформація щодо положення точок контуру, які потрапили у межі дефекту. Часто виникає ситуація, коли числові характеристики дефектів майже рівні, але сторони цих «криволінійних трикутників» мають помітні відмінності. Зважаючи на це виникає необхідність у такому представленні структури дефекту, яке б дозволило не лише відобразити положення точок контуру, які

потрапили у дефект, але й мати можливість порівнювати структури дефектів між собою. В статті пропонується алгоритм побудови векторів ознак, які задовольняють всім згаданим вимогам:

1. Для початкової та кінцевої точок контуру отримати рівняння прямої, яка проходить через ці точки.
2. Маючи координати всіх точок контуру, які потрапили у межі дефекту знайти відповідні відстані від даних точок до прямої отриманої на кроці 1 (див. рис. 4). В результаті отримується числовий вектор

довжина якого дорівнює кількості точок контуру, які потрапили у межі дефекту.

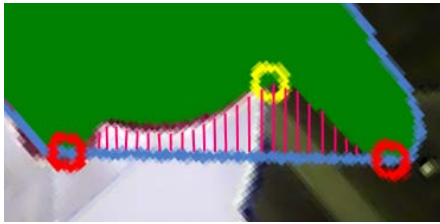


Рисунок 4. Узагальнена ілюстрація другого етапу алгоритму побудови векторів ознак.

3. Стандартизувати отриманий на кроці 2 вектор.

Третій етап алгоритму потребує більш детального розгляду. Необхідність у стандартизації перш за все виникає через динамічність розмірності векторів ознак. Зрозуміло, що кількість точок контуру, які потрапляють у дефект відрізняється для кожної окремої демонстрації жесту. У зв'язку з цим пропонується наступний алгоритм стандартизації вектору ознак:

1. Встановити експериментальним шляхом оптимальну розмірність еталонного вектора ознак.
2. Порівняти розмірність поточного вектора ознак з встановленим на етапі 1 числом. Якщо розмірність поточного вектора ознак більша або рівна, тоді перейти до кроку 3.а, якщо менша – до кроку 3.б.
3. а). Розділити розмірність поточного вектора ознак на число встановлене на етапі 1. Округлену до більшого цілого числа отриману величину позначимо «amount». Починаючи з першого елемента поточного вектору ознак згрупувати елементи вектора у групи розміром amount (або менше у випадку, коли не вистачає елементів). Кожній групі поставити у відповідність середнє значення елементів цієї групи.

Список використаних джерел

1. Donchenko V.S., Golik A.O. Usage of matrix feature vectors in recognition of tactile sign language. // SAIT 2013 System Analysis and Information Technologies, May 27-31, 2013, Kyiv, Ukraine. (in Ukrainian).
2. Golik A.O. Recognition of tactile sign language: designing the feature vectors based on amount and structure of defects. XIX International

б). Доповнити поточний вектор ознак до розмірності встановленої на кроці 1 шляхом вставки між існуючими елементами вектору ознак додаткових елементів, значення яких обчислюється як середнє для значень двох сусідніх існуючих елементів.

4. Нормалізувати отриманий на кроці 3 вектор ознак шляхом ділення всіх його елементів на максимальний елемент цього вектору.

Проведена на кроці 4 нормалізація покликана вирішити проблему зміни відстані від долоні до записуючого пристрою. Зрозуміло, що при віддаленні долоні від веб-камери значення вектору ознак будуть зменшуватися, а при наближенні – збільшуватися. Однак, структура дефекту при цьому не змінюється, а отже нормалізація є обов'язковим кроком.

Отже, отриманий в результаті стандартизації вектор ознак має встановлену розмірність Amount, а значення його елементів знаходяться у інтервалі від нуля до одиниці (див. рис. 5). Такий вектор ознак може бути використаний для визначення степені схожості структури дефектів. Щодо відстаней відповідності, то поряд з евклідовою пропонується еліпсоїдальна та ортогональна відстані відповідності [3].



Рисунок 5. Ілюстрація стандартизованого вектору ознак.

- Conference “Problems of Decision Making under Uncertainties”(PDMU -2012),– April 23-27, 2012.–Mukachevo, Ukraine, с. 83. (in Ukrainian).
3. Donchenko V.S., Golik A.O. Usage of ellipsoidal and orthogonal distances in speech and gesture recognition. // “Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics & Mathematics”, №1, 2013. (in Ukrainian).

Надійшла до редколегії 27.09.13

УДК 621.391:519.24

Дегтяр О.С., аспірант

Алгоритм розв'язання задачі оцінювання концентрації хлорофілу за допомогою введення параметру регуляризації

Розроблено алгоритм апроксимації для відомих та оцінки невідомих значень концентрацій хлорофілу на основі спектральних даних. Для оцінки невідомих значень використовується процедура псевдообернення з використанням регуляризації розв'язку.

Ключові слова: структурно-параметрична оптимізація, псевдообернення, регуляризація.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: olga.degtiar@gmail.com

O. Degtiar, postgraduate (PhD)

Algorithm for solution of chlorophyll concentration estimation problem using regularization parameter

The algorithm for approximating known chlorophyll concentration values and estimating unknown values based on spectrum reflection develop. Pseudoinverse with solution regularization procedure is used for estimating unknown values.

Key Words: Structural and parametric optimization, pseudoinversion, regularization.

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: olga.degtiar@gmail.com

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

Розглядається задача оцінювання концентрації хлорофілу в рослинності на основі спектру відображення. Виконано ряд експериментів з метою запису відображених спектрів відбиття листків з різною концентрацією хлорофілу.

Постановка задачі

Нехай маємо відомі N q -вимірних сигналів спектрального розподілу для N різних концентрацій хлорофілу ($N < q$), де

$c = (c_1, c_2, \dots, c_N)^T$ – відомий вектор значень концентрацій,

$$X = \begin{pmatrix} x_1^1 & x_2^1 & \dots & x_q^1 \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_q^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_1^N & x_2^N & \dots & x_q^N \end{pmatrix} \text{ – відома матриця}$$

відповідних значень спектрального розподілу.

Задача полягає в оцінюванні M -вимірного ($M < q$) вектору концентрацій $c' = (c'_1, c'_2, \dots, c'_N)^T$ на підставі відомих спектральних даних

$$X_{test} = \begin{pmatrix} x_{1\ test}^1 & x_{2\ test}^1 & \dots & x_{q\ test}^1 \\ x_{1\ test}^2 & x_{2\ test}^2 & \dots & x_{q\ test}^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{1\ test}^M & x_{2\ test}^M & \dots & x_{q\ test}^M \end{pmatrix}. \quad (1)$$

При цьому розв'язок шукатиметься у класі лінійних моделей, тобто задача зводиться до знаходження q -вимірного вектору α невідомих параметрів лінійної моделі

$$c = X\alpha, \quad (2)$$

та відновлення за допомогою його та матриці (1) вектору концентрацій c' [3].

Регуляризація розв'язку в задачах псевдообернення

Матриця X не є квадратною, це є матриця розмірності $N \times q$, для якої не існує оберненої X^{-1} . В такому випадку вектор α шукатиметься шляхом псевдообернення матриці X [2]: $\alpha = X^+c$ (тут і далі X^+ - позначення псевдооберненої матриці).

Одним із способів задання псевдооберненої матриці є використання границі обернених [1, 27]

$$X^+ = \lim_{\lambda \rightarrow 0} (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T = \lim_{\lambda \rightarrow 0} X^T (X^T X + \lambda I)^{-1}.$$

При цьому $c' \rightarrow c$ при $\lambda \rightarrow 0$, тобто при $\lambda \rightarrow 0$ знаходиться найкраща апроксимація відомого вектору концентрацій. Проте задача полягає в оцінці невідомих концентрацій, спектральні розподіли яких не розглядаються при знаходженні вектору параметрів α .

Для розв'язання некоректно поставлених задач (розглядається випадок $N < q$, отже мова йде про недовизначену систему лінійних рівнянь (2)) пропонується введення регуляризації $\lambda \neq 0$, що по суті є додаванням певної додаткової інформації до вихідної недовизначеної системи. Такий метод отримав назву метод регуляризації Тихонова[4]. Суть його полягає у зведенні вихідної задачі (2) до мінімізації функціоналу $\|c - X\alpha\|^2 + \lambda\|\alpha\|^2 \rightarrow \min$, де $\|\cdot\|$ – евклідова норма, λ – параметр регуляризації.

Продиференціювавши по α остаточно отримаємо

$$\alpha = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T c, \quad (3)$$

що, власне, і є аналогом псевдооберненої матриці при $\lambda \neq 0$.

Загальні підходи до вибору параметру регуляризації

По суті метод регуляризації полягає у введенні деяких додаткових апіорних оцінок на невідомі параметри моделі. Наприклад, можна шукати розв'язок заданої гладкості, або розв'язок максимально близький до заданого вектору. Мінімізуючи функціонал (3), можна отримати регуляризуючий розв'язок $\alpha(\lambda)$, що залежить від параметру λ .

Зрозуміло, що при малих λ проблема пошуку близька до вихідної (некоректної) задачі, а при великих задача є коректною, проте її розв'язок є далеким від розв'язку вихідної задачі. А саме, зі збільшенням значення параметру регуляризації зменшується відхилення розв'язку від його апіорної оцінки. Очевидно, що на практиці необхідно обирати проміжні значення λ , що встановлюють певний компроміс між прийнятною обумовленістю та близькістю до вихідної задачі.

Алгоритм знаходження параметрів моделі

Одним з методів відшукування параметру регуляризації для вихідної задачі є розбиття вихідної N -вимірної вибірки на n -вимірну тренуючу та m -вимірну валідаційну ($m + n = N$).

Нехай $c_{train} = (c_{train1}, c_{train2}, \dots, c_{trainn})^T$,

$$X_{train} = \begin{pmatrix} x_{1train}^1 & x_{2train}^1 & \dots & x_{qtrain}^1 \\ x_{1train}^2 & x_{2train}^2 & \dots & x_{qtrain}^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{1train}^n & x_{2train}^n & \dots & x_{qtrain}^n \end{pmatrix},$$

$c_{valid} = (c_{valid1}, c_{valid2}, \dots, c_{validm})^T$ та

$$X_{valid} = \begin{pmatrix} x_{1valid}^1 & x_{2valid}^1 & \dots & x_{qvalid}^1 \\ x_{1valid}^2 & x_{2valid}^2 & \dots & x_{qvalid}^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{1valid}^m & x_{2valid}^m & \dots & x_{qvalid}^m \end{pmatrix} - \text{відомі}$$

значення концентрацій та відповідних їм спектральних розподілів.

Невідомі коефіцієнти α знаходяться з лінійної моделі $c_{train} = X_{train}\alpha$. З (3) вони обчислюються за формулою $\alpha(\lambda_{train}) = (X_{train}^T X_{train} + \lambda_{train} I)^{-1} X_{train}^T c_{train}$.

Нижче наведено графіки середньоквадратичного відхилення фактичних значень концентрації від відновлених концентрацій за спектрами $\|c_{train} - X_{train}\alpha(\lambda_{train})\|^2$ та $\|c_{valid} - X_{valid}\alpha(\lambda_{train})\|^2$ для тренуючої та валідаційної вибірок для різних значень параметру регуляризації $\lambda_{train} \in (0, \lambda_1]$.

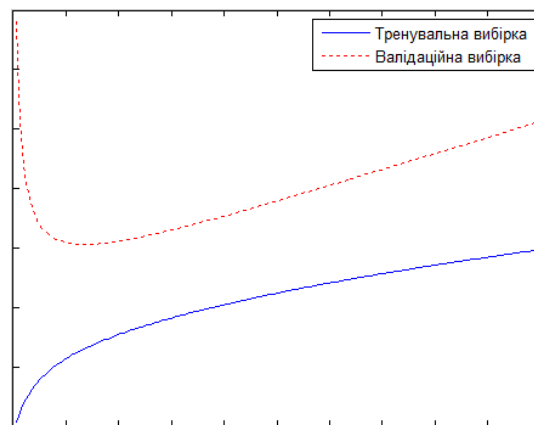


Рис. 1. Графік середньоквадратичного відхилення змодельованого розв'язку від реальних значень концентрацій

Для знаходження остаточного розв'язку вихідної задачі необхідно обрати значення параметру регуляризації λ_{opt} . Для задачі, що розглядається, пропонується обрати компромісне значення параметру для тренуючої та валідаційної вибірок, що є мінімумом відхилення валідаційної вибірки, який береться на

розв'язках, знайдених для тренувальної вибірки

$$\lambda_{opt} = \arg \min_{\lambda_{train} \in (0, \lambda_1]} \|c_{valid} - X_{valid} \alpha(\lambda_{train})\|^2. \quad (4)$$

Результати обчислювального експерименту

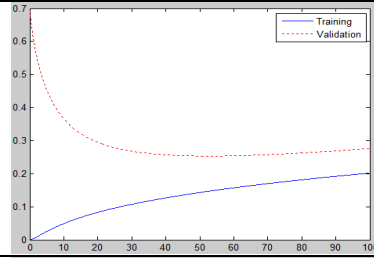
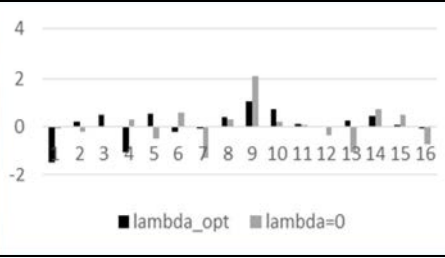
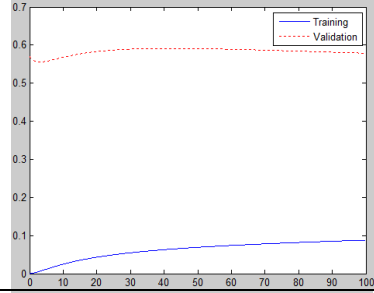
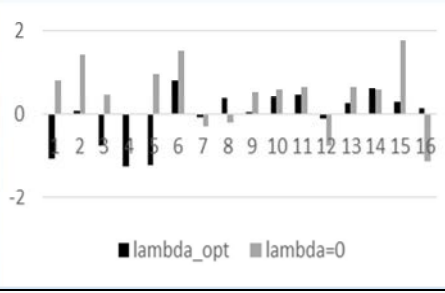
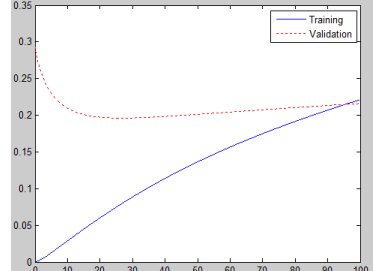
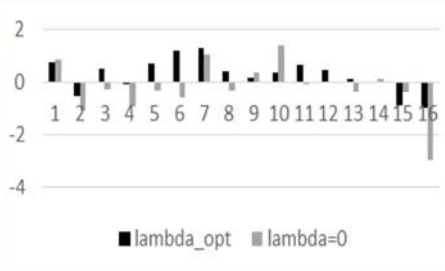
У таблиці 1 наведено результати обчислювального експерименту для 7 різних комбінацій даних 40 352-вимірних ($q = 352$) спектральних розподілів та відповідних їм концентрацій: $N = 24$ ($n = 10$, $m = 14$), $M = 16$.

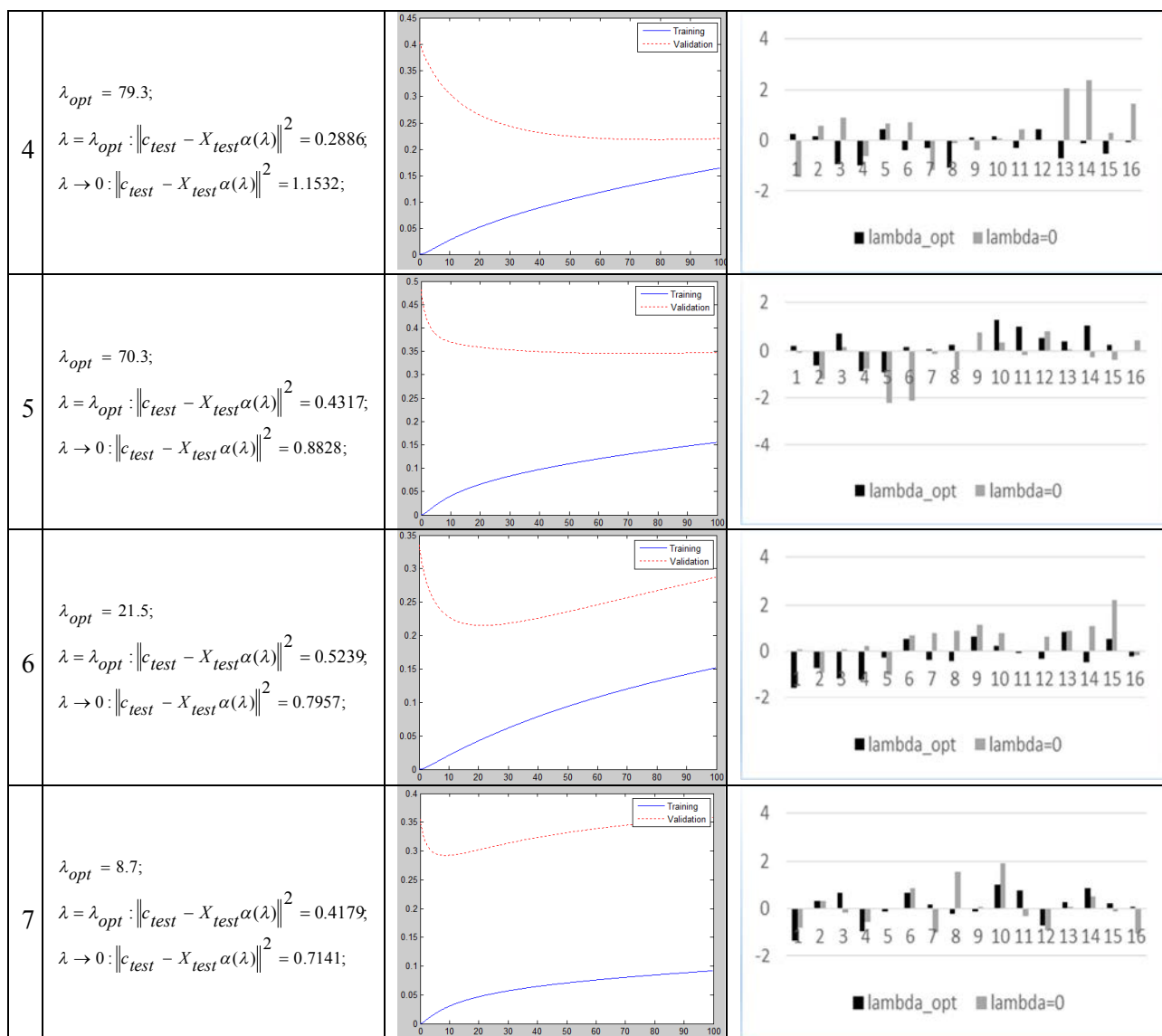
Зокрема для кожної комбінації в таблиці наводяться знайдені за наведеним вище алгоритмом λ_{opt} , середньоквадратичні відхилення фактичних значень концентрації від

відновлених концентрацій за спектрами $\|c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\|^2$ та $\|c_{valid} - X_{valid} \alpha(\lambda_{train})\|^2$ з використанням регуляризації ($\lambda = \lambda_{opt}$) та без неї ($\lambda \rightarrow 0$), графіки знаходження λ_{opt} , графіки оцінок концентрацій c' та її фактичних значень для тестової вибірки (c_{test}) з використанням регуляризації та без неї.

Таблиця 1

Результати обчислювального експерименту з використанням регуляризації та без неї

	Оптимальне значення параметру регуляризації та значення середньоквадратичного відхилення	Середньоквадратичне відхилення фактичних значень концентрації від відновлених концентрацій за спектрами для тренувальної та валідаційної вибірок	Відхилення відновлених значень концентрацій від фактичних з та без використання регуляризації
1	$\lambda_{opt} = 52.6;$ $\lambda = \lambda_{opt} : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 0.3702;$ $\lambda \rightarrow 0 : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 0.5879;$		
2	$\lambda_{opt} = 3.1;$ $\lambda = \lambda_{opt} : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 0.4067;$ $\lambda \rightarrow 0 : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 0.83424;$		
3	$\lambda_{opt} = 26.9;$ $\lambda = \lambda_{opt} : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 0.4899;$ $\lambda \rightarrow 0 : \ c_{test} - X_{test} \alpha(\lambda)\ ^2 = 1.0011;$		



Висновки

В роботі запропоновано алгоритм знаходження апроксимації відомих концентрацій хлорофілу на основі даних спектральних розподілів та оцінка невідомих концентрацій за допомогою введення регуляризації.

Проведено обчислювальний експеримент для оцінки розв'язку з використанням регуляризації та без неї, що показав ефективність використання регуляризації в лінійних моделях для розв'язання задач подібного типу

Список використаних джерел

1. Albert A. Regression, And The Moor-Penrose Pseudoinverse. - Moscow, Nauka, 1977. - 224p.
2. Boublik B.N., Garashchenko F.G., N.F. Kirichenko Structural stability and parametric optimization of beam dynamics. - Kiev, Nauk.dumka, 1985. - 304p.

3. Garashchenko F.G., Shvets O.F., Degtyar O.S. Adaptive models of approximation of signals in structural and parametric classes of functions. // Journal of Automation and Information Sciences. - 2011. Volume 2. - P. 69 – 77.
4. Kirianov D.V., Kirianova E.N. Computational Physics. - Moscow, Polybook Multimedia, 2006. - 352p.

Надійшла до редколегії 26.09.13

УДК 519.6 531

Зуб С.С., к. т. н., Зуб С.І. н.сп.

Група одиничних кватерніонів S^3 і пов'язані з нею симплектична і пуассонова структури

В даній роботі розглядається канонічна пуассонова структура на кодотичному розшируванні T^*S^3 групи одиничних кватерніонів $S^3 \subset H$. З'ясовано сенс алгебри дужок Пуассона з кватерніонними змінними та розкрито їх зв'язок з внутрішньою структурою групи.

Ключові слова: кватерніон, форма Ліувіля, пуассонові структури.

*E-mail: stah@univ.kiev.ua

Статтю представив д.т.н. Кудін В.І.

1. Вступ

У статті [1], що присвячена гамільтоновій динаміці твердого тіла було отримано пуассонову структуру для кватерніонів як динамічних змінних на групах $SE(3)$ ($SO(3)$).

Ця структура формально збігається з пуассоновою структурою, що була досліджена А.В. Борисовим та І.С. Мамаєвим [2,3]. Вони отримують дужки Пуассона з кватерніонами, виходячи з глибокого аналізу структури $e(4) = Lie(SO(4))$. При цьому відповідна пуассонова структура виступає як структура Лі-Пуассона на $e(4)^*$. Досліджуються орбіти дії цієї алгебри Лі. Одна з досліджених орбіт гомеоморфна многовиду T^*S^3 . При цьому S^3 розглядається як многовид, а не як група.

Разом з тим, на T^*S^3 як на кодотичному розшируванні до будь-якої групи Лі існують класичні симплектична і пуассонова (не Лі-Пуассона) структури [4,5]. Існування цих структур визначається 1-формою Ліувіля на кодотичних розшируваннях та класичною дією групи Лі (*Cotangent Lift*) на своєму кодотичному розшируванні.

Даний підхід дозволяє вивести дужки Пуассона з кватерніонами як прямий наслідок канонічної симплектичної структури на T^*S^3 . Такий розгляд повністю вкладається в схему викладену в роботі [5] і принципово ґрунтується лише на внутрішній структурі групи S^3 на

S. S. Zub, Ph.D., S. I. Zub, researcher

The group of unit quaternion S^3 and associated symplectic and Poisson structures

In this paper we consider the canonical Poisson structure on the cotangent bundle T^*S^3 of the unit quaternion group $S^3 \subset H$. We clarify the algebraic sense of the Poisson brackets with quaternion variables and expose there association with inner structure of the group.

Key Words: quaternion, Liouville one form, Poisson structure.

відміну від підходу робіт [2,3]. Це дозволяє більшою мірою залучати не лише методи алгебри, але й диференціально-геометричні методи дослідження таких систем [4].

2. Група Лі як конфігураційний простір

Приведемо деякі результати роботи [5], в якій загальна група Лі G розглядається як конфігураційний простір механічної системи.

Для опису кодотичного розширення T^*G використовується представлення лівої тривіалізації, яке в механіці твердого тіла асоціюється з системою відліку, що пов'язана з тілом.

$$\begin{cases} \lambda_t = \tau_G \times \varepsilon : T(G) \mapsto G \times \mathfrak{g}, \\ \lambda_{cl} = \pi_G \times \mathbf{J}_R : T^*(G) \mapsto G \times \mathfrak{g}^*, \end{cases} \quad (2.1)$$

де ε - (векторозначна) 1-форма Маурера-Картана, а $\mathbf{J}_R$ - відображення моменту, що відповідає дії групи G на собі правими зсувами [4]

$$\mathbf{J}_R : T^*(G) \mapsto \mathfrak{g}^*, \quad \mathbf{J}_R(\alpha_a) = T_e^* L_a \cdot \alpha_a. \quad (2.2)$$

Представлення лівої тривіалізації дозволяє записувати дотичний вектор $\xi \in T_{\alpha_a}^*(G)$ у вигляді пари

$$\begin{cases} \xi_{(h)} = \pi_G^* \varepsilon(\xi) \in \mathfrak{g}, \\ \xi^{(v)} = T\mathbf{J}_R \cdot \xi \in \mathfrak{g}^*, \end{cases} \quad (2.3)$$

де точка закріплення α_a в представленні лівої тривіалізації (2.1) сама є парою $(a, \alpha) \in G \times \mathfrak{g}^*$.

Введемо координатні функції

$$\mu_i(\alpha_a) = \langle \mathbf{J}_R(\alpha_a), e_i \rangle. \quad (2.4)$$

Тоді

$$d\mu_i(\xi) = \xi_i^{(v)}. \quad (2.5)$$

Диференціал функції F на $T^*(G)$ слід розкласти відповідно до розкладання вектора дотичного до $T^*(G)$ розшарування.

Відповідно до розкладання (2.3) запишемо

$$\partial_\xi F = dF \cdot \xi = \delta_g F \cdot \xi_{(h)} + \delta_\mu F \cdot \xi^{(v)}, \quad (2.6)$$

$$\xi \in T_{\alpha_a}(T^*(G)).$$

Співвідношення (2.6), фактично, є визначенням “диференціалів” δ_g та δ_μ , причому останній є справжнім частинним диференціалом.

Група Лі діє на собі, як на конфігураційному просторі, лівими та правими зсувами. Ці перетворення розширюються (піднімаються) на кодотичне розшарування таким чином.

Cotangent Lift цих зсувів визначається при лівій тривіалізації так:

$$\begin{cases} T_* L_b \mapsto L_b \times id_{\mathfrak{g}^*}, \\ T_* R_{b^{-1}} \mapsto R_{b^{-1}} \times Ad_{b^{-1}}^*. \end{cases} \quad (2.7)$$

Тоді для лівоінваріантного поля на $T^*(G) \cong G \times \mathfrak{g}^*$ маємо

$$\tilde{\xi}_{(a, \mu)}^L = (\xi, ad_\xi^* \mu). \quad (2.8)$$

Симплектична 2-форма Ω на $T^*(G)$ визначається наступним співвідношенням:

$$\begin{aligned} \Omega_{(a, \mu)}(\xi, \eta) &= \langle \eta^{(v)}, \xi_{(h)} \rangle - \langle \xi^{(v)}, \eta_{(h)} \rangle + \\ &+ \langle \mu, [\xi_{(h)}, \eta_{(h)}] \rangle, \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\xi \in T_{(a, \mu)}(T^*(G)).$$

Дужки Пуассона на $T^*(G)$, що відповідають канонічній симплектичній структурі (2.9), мають вигляд

$$\begin{aligned} \{F, H\}_{(a, \mu)} &= (\delta_g F \cdot \delta_\mu H - \delta_g H \cdot \delta_\mu F - \\ &- \langle \mu, [\delta_\mu F, \delta_\mu H] \rangle)_{(a, \mu)}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

де використано визначення диференціалів δ_g, δ_μ з (2.6).

3. Дотичне розшарування до групи $S^3 \subset H$ та її алгебра Лі

Важливою особливістю групи $S^3 \subset H$ є те, що вона вкладена в асоціативну алгебру. Це дозволяє розглядати елементи дотичного та кодотичного розшарування до групи, як елементи тієї ж алгебри. Таким чином, крива на групі є також кривою в лінійному просторі. Тому вектор “швидкості” ξ на цій кривій, тобто елемент $\xi \in T(S^3)$, можна вважати елементом H .

$$q(t)q(t)^\dagger = 1 \longrightarrow \dot{q}q^\dagger + q\dot{q}^\dagger = \langle q, \dot{q} \rangle = 0 \quad (3.1)$$

тобто дотичні вектори до S^3 в точці q можуть бути представлені, як кватерніони ξ , ортогональні до кватерніону q .

Лівий (правий) зсув дотичного вектору в цьому представленні збігається з множенням кватерніона, що представляє дотичний вектор, на кватерніон, що генерує лівий (правий) зсув.

Дійсно, нехай $q(t)|_{t=0} = a$

$$T_a L_b \cdot \dot{q} = \frac{d}{dt} (L_b q(t))|_{t=0} = \frac{d}{dt} (b q(t))|_{t=0} = b \dot{q} \quad (3.2)$$

Пропозиція 1. Якщо $\mathbf{e}$ - чистий кватерніон, то $\xi = L_q \mathbf{e} = q \mathbf{e} \in T(S^3)$ і, навпаки, якщо $\xi \in T(S^3)$, то $q^{-1} \xi = q^\dagger \xi$ - чистий кватерніон ($q \in S^3$).

Аналогічні твердження справедливі також для правих зсувів.

□

Те, що $\mathbf{e}$ - чистий кватерніон, можна представити таким чином

$$\mathbf{e} + \mathbf{e} = 0 \longrightarrow \mathbf{e} e_0 + e_0 \mathbf{e} = 0 \longrightarrow$$

$$\langle e_0, \mathbf{e} \rangle = 0 \longrightarrow \langle L_{q^{-1}} e_0, L_q \mathbf{e} \rangle = 0$$

і, навпаки

$$\langle q, \xi \rangle = 0 \longrightarrow \langle L_{q^{-1}} q, L_{q^{-1}} \xi \rangle = 0 \longrightarrow$$

$$\langle e_0, q^{-1} \xi \rangle = 0 \longrightarrow q^{-1} \xi + (q^{-1} \xi)^\dagger = 0$$

■

Наслідок. Дотичний простір в одиниці групи можна ототожнити з підпростором чистих кватерніонів.

Як показано в [1], довільний одиничний кватерніон (тобто довільний елемент S^3) може бути представлений у вигляді

$\cos(\varphi/2)\mathbf{e}_0 + \sin(\varphi/2)\mathbf{e}$, де $\mathbf{e}$ - одиничний чистий кватерніон.

Вибір половинного кута в якості параметра однопараметричної підгрупи пов'язаний з інтерпретацією гомоморфізму $\Gamma: S^3 \mapsto SO(3)$, при якому $\mathbf{e}$ задає вісь обертання, а φ - відповідний кут повороту довкола цієї осі.

Для дослідження алгебри Лі $Lie(S^3)$ буде зручніше записуватиме однопараметричну підгрупу у вигляді

$$\exp(t\mathbf{e}) = \cos(t)\mathbf{e}_0 + \sin(t)\mathbf{e}. \quad (3.3)$$

Відповідно, чистий одиничний кватерніон $\mathbf{e}$ можна вважати елементом алгебри $Lie(S^3)$.

Для нашого розгляду зручно вважати базисом $Lie(S^3)$ набір твірних e_i , $i = 1, 2, 3$.

Тоді структурні константи c^l_{rs} даної алгебри Лі матимуть вигляд

$$[e_r, e_s] = e_r e_s - e_s e_r = 2\varepsilon_{rst} e_t = c^t_{rs} e_t \quad (3.4)$$

Отже, зі всього вищезазначеного випливає, що $Lie(S^3) = T_e(S^3)$ можна ототожнити з підпростором чистих кватерніонів.

Пропозиція 2. Підпростір чистих кватерніонів є евклідовим простором, причому оператор $\text{Ad}_q \in SO(3)$.

□

Дійсно [1, с. 5],

$$\text{Ad}_q[\mathbf{e}] = \frac{d}{dt}(q \exp(t\mathbf{e}) q^{-1})|_{t=0} = \quad (3.5)$$

$$\Gamma = \frac{d}{dt} q \mathbf{e} q^{-1} = q \mathbf{e} q^{-1} = (q)[\mathbf{e}].$$

■

Тепер неважко вивести вираз для дужки Лі

$$\begin{aligned} \text{ad}_\xi[\eta] &= \frac{d}{dt} \text{Ad}_{\exp(t\xi)}[\eta]|_{t=0} = \\ &= \frac{d}{dt} (\exp(t\xi) \eta \exp(-t\xi)) = \xi \eta - \eta \xi, \end{aligned}$$

тобто

$$\text{ad}_\xi[\eta] = \xi \eta - \eta \xi = [\xi, \eta] = 2\xi \times \eta. \quad (3.6)$$

Кватерніонозначна 1-форма dq може використовуватися для представлення векторів на $T(S^3)$, хоча диференціали dq^α і не є незалежними.

Розглянемо кватерніонозначну 1-форму ε

$$\varepsilon = q^{-1} dq. \quad (3.7)$$

Внаслідок Пропозиції 1 вона набуває значення в підпросторі чистих кватерніонів,

тобто в алгебрі Лі $Lie(S^3)$ і, крім того, є лівоінваріантною.

Таким чином, ε є формою Маурера-Картана для групи S^3 .

4. Дуальний до алгебри Лі простір та розшарування $T^*(S^3)$

На $T(S^3)$ з H індукується евклідова метрика, що інваріантна одночасно відносно лівих та правих зсувів. Зокрема, $T_e(S^3)$ є підпростором чистих кватерніонів і водночас 3-мірним евклідовим простором. Метрика на $Lie(S^3) = T_e(S^3)$ дозволяє ототожнити $Lie^*(S^3)$ та $Lie(S^3)$.

Дійсно, чистий кватерніон κ визначає лінійну форму на $Lie(S^3) = T_e(S^3)$ по формулі

$$\kappa[\xi] = \langle \kappa, \xi \rangle, \quad \forall \xi \in Lie(S^3). \quad (4.1)$$

Обчислимо оператор $\text{Ad}_q^*[\mu]$

$$\begin{aligned} \langle \text{Ad}_q^*[\mu], \xi \rangle &= \langle \mu, \text{Ad}_q[\xi] \rangle = \\ &= \langle \mu, q \xi q^{-1} \rangle = \langle q^{-1} \mu q, \xi \rangle = \langle q^\dagger \mu q, \xi \rangle \end{aligned}$$

тобто

$$\text{Ad}_q^*[\mu] = q^{-1} \mu q = q^\dagger \mu q. \quad (4.2)$$

Оператор ad_ξ^* можна знайти або як похідну по t для $\text{Ad}_q^*[\mu]$ при $q(t) = \exp(t\xi)$, або як оператор, спряжений до ad_ξ . В будь-якому разі отримаємо наступний результат

$$\text{ad}_\xi^*[\mu] = [\mu, \xi] = 2\mu \times \xi. \quad (4.3)$$

В світлі вищезазначеного, враховуючи існування двосторонньо інваріантної метрики на S^3 , можна ототожнити $T^*(S^3)$ та $T(S^3)$.

Фундаментальна 1-форма Маурера-Картана, як вже було відзначено, має простий вигляд

$$\varepsilon: \xi \in T_q(S^3) \mapsto q^{-1} \xi \in Lie(S^3). \quad (4.4)$$

Для відображення моменту $\mathbf{J}_R$ маємо

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_R &= q^{-1} (\nabla - q \langle q, \nabla \rangle) = \\ &= \text{Im}(q^{-1} \nabla) = q^\dagger \nabla - q^\alpha \frac{\partial}{\partial q^\alpha}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\nabla = e_\nu \frac{\partial}{\partial q^\nu}.$$

Відповідно, ліва тривіалізація дотичного та кодотичного розшарувань визначається стандартними співвідношеннями (2.1).

5. Елементи диференціального обчислення на $T^*(S^3)$

Можна переконатися, що дотичне відображення TJ_R , дійсно, переводить елемент з $T(T^*(S^3))$ в чистий кватерніон.

Розглянемо деяку криву

$$(q(t), \kappa(t)) : |q(t)| = 1, \langle q(t), \kappa(t) \rangle = 0 \quad (5.1)$$

Співвідношення $\langle q(t), \kappa(t) \rangle = 0$ можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} \langle q(t), \kappa(t) \rangle = 0 &\longrightarrow \\ q(t)^\dagger \kappa(t) + \kappa(t)^\dagger q(t) &= 0 \longrightarrow \\ \dot{q}^\dagger \kappa + q^\dagger \dot{\kappa} + \dot{\kappa}^\dagger q + \kappa^\dagger \dot{q} &= 0. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Маємо

$$TJ_R(\dot{\kappa}) = \dot{q}^\dagger \kappa + q^\dagger \dot{\kappa} \quad (5.3)$$

Тоді

$$\begin{aligned} TJ_R(\dot{\kappa}) + (TJ_R(\dot{\kappa}))^\dagger &= \\ = \dot{q}^\dagger \kappa + q^\dagger \dot{\kappa} + \dot{\kappa}^\dagger q + \kappa^\dagger \dot{q} &= 0 \end{aligned} \quad (5.4)$$

тобто $TJ_R(\dot{\kappa})$ - чистий кватерніон, і можна вважати, що $TJ_R(\dot{\kappa}) \in Lie^*(S^3)$.

Отже, якщо вектор $\xi \in T(T^*(S^3))$, то в представленні лівої тривіалізації він має вигляд

$$\begin{cases} \xi_{(h)} = \pi^* \varepsilon(\xi) \in Lie(S^3), \\ \xi^{(v)} = TJ_R \cdot \xi \in Lie^*(S^3). \end{cases} \quad (5.5)$$

Розглянемо деяку криву $(q(t), \kappa(t))$ на $T^*(S^3)$. Її проекцією на S^3 буде $q(t)$. Якщо крива $(q(t), \kappa(t))$ повністю розташована в одному шарі $T^*(S^3)$, тобто $q(t) = const$, то 1-й рядок (5.5) дає $\xi_{(h)} = 0$.

Якщо ж $J_R(\kappa(t)) = \mu = const$, то $\kappa(t) = q(t)\mu$, тобто крива $\kappa(t)$ повністю визначається своєю проекцією $q(t)$ на G . В цьому випадку $\xi^{(v)} = 0$.

Введемо координатні функції

$$\mu_i(\kappa_q) = \langle J_R(\kappa_q), e_i \rangle = \langle e_i, q^{-1} \kappa_q \rangle. \quad (5.6)$$

Тоді

$$d\mu_i(\xi) = \xi_i^{(v)} \quad (5.7)$$

Розглянемо деяку функцію $F(q, \mu)$.

Диференціал функції на $T^*(S^3)$ слід розкласти відповідно до розкладання вектора, дотичного до $T^*(S^3)$ розшарування.

Відповідно до розкладання (5.5) запишемо

$$\partial_\xi F = dF \cdot \xi = \delta_q F \cdot \xi_{(h)} + \delta_\mu F \cdot \xi^{(v)}, \quad (5.8)$$

$$\xi \in T_{\kappa_q}(T^*(S^3)).$$

Співвідношення (5.8), фактично, є визначенням "диференціалів" δ_q і δ_μ , причому останній є справжнім частинним диференціалом.

З (5.8) також витікає, що

$$\delta_q F \in Lie^*(S^3), \quad \delta_\mu F \in Lie(S^3). \quad (5.9)$$

Розберемо 2 частинні випадки.

1. Розглянемо функції вигляду $F(q)$.

Зазначимо, що диференціал функції $F(q)$, будучи лінійною формою на дотичних до S^3 векторах, тим самим є елементом $T^*(S^3)$, тобто $d_{|\kappa}(F \circ \pi_G) \in T_{|\kappa}^*(G)$. Тоді

$$\begin{cases} \delta_\mu F = 0, \\ \delta_q F = J_R(dF_{|q}) = (q^\dagger \nabla - q^\alpha \frac{\partial}{\partial q^\alpha}) F, \end{cases} \quad (5.10)$$

$$\nabla = e_\nu \frac{\partial}{\partial q^\nu}.$$

2. Розглянемо функції, що в представленні лівої тривіалізації залежні лише від змінних μ на $Lie(S^3)$. Множина таких функцій, вочевидь, збігається з множиною лівоінваріантних функцій.

$$\begin{cases} \delta_\mu F = \partial_\mu F, \quad \partial_\mu = e_i \frac{\partial}{\partial \mu_i}, \\ \delta_q F = 0. \end{cases} \quad (5.11)$$

6. Дужки Пуассона на $T^*(S^3)$

Загальна формула (2.10) для дужок Пуассона на групі в нашому випадку $T^*(S^3)$ має вигляд

$$\{F, G\} = \langle \delta_q F, \delta_\mu G \rangle - \langle \delta_q G, \delta_\mu F \rangle - \langle \mu, [\delta_\mu F, \delta_\mu G] \rangle. \quad (6.1)$$

З (5.10) ясно, що

$$\{F(q), G(q)\} = 0. \quad (6.2)$$

Також легко бачити з (5.11), що

$$\{F(\mu), G(\mu)\} = -\langle \mu, [\delta_\mu F, \delta_\mu G] \rangle. \quad (6.3)$$

Нехай, зокрема, $F(\mu) = \mu_i, G(\mu) = \mu_j$.

Маємо

$$\delta_\mu(\mu_i) = \frac{\partial \mu_i}{\partial \mu_r} e_i. \quad (6.4)$$

$$\{\mu_i, \mu_j\} = -\langle \mu, [e_i, e_j] \rangle = -2\varepsilon_{ijk} \langle \mu, e_k \rangle = -2\varepsilon_{ijk} \mu_k \quad (6.5)$$

Нехай тепер $F(\mu) = \mu_i, G(\mu) = q_j$.

Тоді з (6.1) отримуємо

$$\{\mu_i, q_j\} = -\langle \delta_q(q_j), \delta_\mu(\mu_i) \rangle.$$

При цьому

$$\begin{aligned} \delta_q(q_j) &= \left(q^* \nabla - q^\alpha \frac{\partial}{\partial q^\alpha} \right) q_j = \\ &= \left((q^0 - q^s e_s) \left(e_\nu \frac{\partial}{\partial q^\nu} \right) - q^\alpha \frac{\partial}{\partial q^\alpha} \right) q_j = \\ &= (q^0 - q^s e_s) e_j - q_j = \\ &= q^0 e_j - q^s e_s e_j - q_j = \\ &= q^0 e_j - q^s (-\delta_{sj} e_0 + \varepsilon_{sjl} e_l) e_t - q_j = \\ &= q^0 e_j + q^j - q^s \varepsilon_{sjl} e_l - q_j = \\ &= q^0 e_j - q^s \varepsilon_{sjl} e_l \end{aligned}$$

Таким чином

$$\delta_q(q_j) = q^0 e_j - q^s \varepsilon_{sjl} e_l \quad (6.6)$$

Отже

$$\{\mu_i, q_j\} = -\langle (q^0 e_j - q^s \varepsilon_{sjl} e_l), e_i \rangle = -q^0 \delta_{ij} + q^s \varepsilon_{sji}$$

тобто

$$\{\mu_i, q_j\} = -q^0 \delta_{ij} - q^s \varepsilon_{ijs}. \quad (6.7)$$

Аналогічні обчислення для q^0 дають

$$\{\mu_i, q_0\} = q_i. \quad (6.8)$$

В результаті отримуємо

$$\begin{cases} \{\mu_i, \mu_j\} = -2\varepsilon_{ijk} \mu_k, \\ \{\mu_i, q_0\} = q_i, \\ \{\mu_i, q_j\} = -q^0 \delta_{ij} - q^s \varepsilon_{ijs}. \end{cases} \quad (6.9)$$

Стандартний базис ε_i для $Lie(SO(3))$

відрізняється від вибраного для зручності роботи з кватерніонами базисом e_i , тому

$$\begin{cases} e_i = 2\varepsilon_i \leftrightarrow \varepsilon_i = \frac{1}{2} e_i, \\ e^i = \frac{1}{2} \varepsilon^i \leftrightarrow \varepsilon^i = 2e^i, \\ \mu_i e^i = \frac{\mu_i}{2} \varepsilon^i = m_i \varepsilon^i \longrightarrow \end{cases} \quad (6.10)$$

$$m_i = \frac{\mu_i}{2} \leftrightarrow \mu_i = 2m_i.$$

Підставляючи останнє співвідношення в (6.9), маємо

$$\begin{cases} \{m_i, m_j\} = -\varepsilon_{ijk} m_k, \\ \{m_i, q_0\} = \frac{1}{2} q_i, \\ \{m_i, q_j\} = -\frac{1}{2} (q^0 \delta_{ij} + q^s \varepsilon_{ijs}). \end{cases} \quad (6.11)$$

Це збігається з виразом, що наведений в книзі [3, (2.7), с.103].

В нашій роботі [1] співвідношення аналогічні (6.11) виведені іншим способом в *інерційній* системі відліку, що відповідає *правій* тривіалізації.

7. Алгебраїчний сенс дужок Пуассона на $T^*(S^3)$

В попередньому розділі були отримані дужки Пуассона для кватерніонних змінних, що повністю визначають канонічну пуассонову структуру на $T^*(S^3)$

$$\begin{cases} \{\mu_i, \mu_j\} = -2\varepsilon_{ijk} \mu_k, \\ \{\mu_i, q_0\} = q_i, \\ \{\mu_i, q_j\} = -q^0 \delta_{ij} - q^s \varepsilon_{ijs}, \\ \{q_\mu, q_\nu\} = 0. \end{cases} \quad (7.1)$$

Цим співвідношенням можна надати більш компактний вигляд, що прояснює алгебраїчний сенс цих співвідношень.

Для цього треба домовитись про те, що постійні кватерніони можна вносити під знак дужки Пуассона.

Тоді, домножаючи 2-й та 3-й рядки в (7.1) на елементи $e_0, e_j, j=1..3$ і складаючи їх, отримаємо

$$\begin{aligned} \{\mu_i, q_0 e_0 + q_j e_j\} &= \\ &= q_i e_0 - (q^0 \delta_{ij} + q^s \varepsilon_{ijs}) e_j = \\ &= q_i e_0 - q^0 e_i - \varepsilon_{ijs} q^s e_j. \end{aligned}$$

Маємо також

$$\begin{aligned} (q_0 e_0 + q_j e_j) e_i &= q^0 e_i + q_j e_j e_i = \\ &= q^0 e_i + q_j (-\delta_{ji} e_0 + \varepsilon_{jir} e_r) = \\ &= q^0 e_i - q_i e_0 + \varepsilon_{jir} q_j e_r = \\ &= q^0 e_i - q_i e_0 + \varepsilon_{rij} q_r e_j. \end{aligned}$$

Інакше кажучи

$$\{\mu_i, q_0 e_0 + q_j e_j\} = -(q_0 e_0 + q_j e_j) e_i,$$

тобто

$$\{\mu_i, q\} = -q e_i. \quad (7.2)$$

Візьмемо тепер лінійну комбінацію (7.2) з числовими коефіцієнтами ξ_i :

$$\{q, \langle \mu, \xi \rangle\} = q\xi. \quad (7.3)$$

Виконаємо аналогічні перетворення з 1-м рядком (7.1). Отримаємо

$$\begin{aligned} \{\mu, \langle \mu, \xi \rangle\} &= 2\varepsilon_{ijk}\xi_i\mu_k e_j = \\ &= -2\varepsilon_{ikj}\xi_i\mu_k e_j = -2\xi \times \mu = \\ &= \text{ad}_\xi^*[\mu]. \end{aligned}$$

Отже

$$\begin{cases} \{\mu, \langle \mu, \xi \rangle\} = \text{ad}_\xi^*[\mu], \\ \{q, \langle \mu, \xi \rangle\} = q\xi = L_q \xi, \end{cases} \quad (7.4)$$

$$\{F(q), G(q)\} = 0. \quad (7.5)$$

Співвідношення (7.4) означають, що динамічна змінна $\langle \mu, \xi \rangle$ є гамільтоніаном-генератором лівоінваріантного поля (2.8)

$$\begin{cases} \xi_{(h)} = \xi, \\ \xi_{(v)} = \text{ad}_\xi^*[\mu], \end{cases} \quad (7.6)$$

причому гамільтоніан визначається виразом (див. [6, доб. 5] та [4, 5])

$$\begin{aligned} H_\xi(q, \mu) &= \langle \mu, \xi \rangle = \\ &= \theta_{(q, \mu)}(\xi^L) = \mathbf{J}_R(q, \mu)[\xi], \end{aligned} \quad (7.7)$$

де θ - канонічна 1-форма Ліувіля на $T^*(S^3)$, яка в карті λ_{cl} (2.1) має вигляд

$$\theta_{(q, \mu)} = \mu_i(q^{-1}dq)^i = \langle \mu, (q^{-1}dq) \rangle. \quad (7.8)$$

Відповідна до наведеної вище пуассонової структури (6.1) симплектична 2-форма виражається через θ стандартним чином

$$\omega = -d\theta. \quad (7.9)$$

Примітка: Цікаво відзначити, що дужка Пуассона $\{q, \langle \mu, \xi \rangle\} = q\xi$ (7.4) повністю визначає закон множення кватерніонів в алгебрі H .

Література

1. Zub S.S. Canonical Poisson structure on $T^*SE(3)$ in the quaternion variables / S.S. Zub, S.I. Zub // Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physics & Mathematics — 2013. — №2. — P. 17–24.
2. Borisov A. V. Nonlinear Poisson Brackets and Isomorphisms in dynamics / A.V. Borisov, I.S. Mamaev // Reg. and chaotic dynamics — 1997. — V. 2, № 3/4. — P. 72–89. (in Russian).
3. Borisov A. V. Poisson Structures and Lie Algebras in Hamiltonian Mechanics / A. V. Borisov, I.S. Mamaev. — Izhevsk: Reg. and chaotic dynamics, 1999. — 464 p. (in Russian)
4. Marsden J. Introduction to mechanics and symmetry. A basic exposition of classical mechanical systems / J. Marsden, T. Ratiu. — Texts in Applied Mathematics 17, Springer-Verlag, New York, 1994. — 553 p.
5. Zub S.S. Lie group as a configuration space for the simple mechanical system / S.S. Zub // J. Num. Appl. Math. — 2013. — V. 109, — №2. — P. 89–94. (in Russian)
6. Arnold V.I. Mathematical Methods of Classical Mechanics / V.I. Arnold. — Second Edition. — New York: Springer-Verlag, 1989. — 516 p.

Надійшла до редколегії 15.06.13

УДК 519.87

Івохін Є.В., д.ф.-м.н, доцент

Про схеми формалізації динамічних процесів в нечітких різницевих системах

В роботі розглянуто задачу моделювання процесів, що описуються нечіткими різницевиими системами. Запропоновано схеми формалізації дії операторів, що визначають динаміку процесів в ситуаціях прийняття рішень. Розглянуто оригінальний спосіб представлення міри належності нечіткій множині. Запропоновано спеціальні операції, які дозволяють формалізувати динаміку нечітких різницевих систем.

Ключові слова: нечітка множина, моделювання динаміки, різницева система, алгоритми формалізації

Киевский национальный университет
имени Тараса Шевченко
e-mail: ivohin@univ.kiev.ua

Ivokhin E.V., Dr.Sc., associate professor

On scheme formalization of dynamic processes in fuzzy difference systems

In this paper the problem of modeling the processes described by difference-fuzzy systems is considered. It is proposed a schema formalization of operators that determine the dynamics of processes in decision-making situations. The original way of presenting degree of fuzzy set is considered. It is proposed the special operations, allowing to formalize the fuzzy difference systems dynamic.

Key words: fuzzy set, modelling of dynamics, difference system, algorithms of formalization

Taras Shevchenko National University of Kyiv
e-mail: ivohin@univ.kiev.ua

Статью представил доктор технических наук, проф. Волошин А.Ф.

Розглянемо задачу моделювання динаміки неперервних та дискретних нечітких систем. Зрозуміло, що моделювання та аналіз динамічних систем, що функціонують в умовах невизначеності (наявність перешкод, неврахованих факторів, помилок та інше), приводять до необхідності застосування математичних методів обробки нечіткої інформації.

Потрібно зауважити, що формальні модельні представлення з реалізаціями невизначеностей на заданих допустимих множинах легко розповсюджуються на широко вжиті останнім часом нечіткі моделі, методи побудови і функціонування яких базується на принципах теорії нечітких множин і нечіткої логіки [1-4].

На цьому шляху можуть бути отримані узагальнення традиційних методів дослідження динаміки систем, теорії управління і оптимізації. У частинному випадку, замість детермінованої задачі одночасного керування усім сімейством "рівноправних" об'єктів здійснюється перехід до задачі управління нечітким пучком траєкторій динамічної системи, що визначається рішенням відповідного нечіткого відображення, яке утворюється нечіткою множиною допустимих невизначених факторів, з наступним запровад-

женням до такої задачі результатів теорії оптимального керування детермінованими системами.

На практиці в нечітких динамічних системах широко використовуються постановки задач моделювання та управління, що відрізняються від класичних лише розширенням множини станів до поняття нечіткої множини.

Означення 1. Нечіткою множиною $\tilde{X}$ універсальної множини X , називається сукупність пар $\tilde{X} = \{(x, \mu_{\tilde{X}}(x))\}$, де $\mu_{\tilde{X}}(x): X \rightarrow [0,1]$ – відображення множини X в одиничний відрізок $[0,1]$, яке називається функцією належності нечіткої множини $\tilde{X}$.

Величина функції належності $\mu_{\tilde{X}}(x)$ визначає ступінь належності елемента $x \in X$ до нечіткої множини $\tilde{X}$. Інтерпретацією ступеня належності $\mu_{\tilde{X}}(x)$ є суб'єктивна міра того, наскільки елемент $x \in X$ відповідає поняттю, зміст якого формалізується нечіткою множиною $\tilde{X}$.

Розглянемо динаміку нечіткої системи у вигляді різницевої моделі:

$$\mu_{k+1}(x) = A_k \circ \mu_k(x), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

де $x = (x_1, \dots, x_n) \in R^n$, $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$ – оператори, що визначають зміну значень функцій належності, $\mu_k(x) = (\mu_k(x_1), \dots, \mu_k(x_n))^T$, $\mu_{k+1}(x) = (\mu_{k+1}(x_1), \dots, \mu_{k+1}(x_n))^T$ – вектор-функції належності елементів $x_1, \dots, x_n$ до нечітких множин $\tilde{X}(t)$ у моменти часу t_k, t_{k+1} відповідно, “ $\circ$ ” – операція композиції.

Еволюцію нечітких динамічних систем можна формалізувати у вигляді різницевої моделі (1) за умов визначення правил побудови та дії операторів $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$.

Модель (1) часто застосовується для опису динаміки ситуацій прийняття рішень [4]. Запропонуємо підходи для побудови операторів $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$, використовуючи методи експертного опитування та теорії прийняття рішень.

Будемо вважати, що нечітка різницева система (1) може знаходитися у станах, що описуються нечіткими множинами $\tilde{X}_k, k = 0, 1, 2, \dots$ універсальної множини $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ з різними ступенями належності $\mu_{\tilde{X}_k}(x_i) = \mu_k(x_i), i = \overline{1, n}, k = 0, 1, 2, \dots$. Це означає, що ситуація прийняття рішення в будь-який момент часу описується як результат обробки експертного опитування, який визначається нечіткою множиною $\tilde{X}_k = \{(x_i, \mu_k(x_i))\}_{i=\overline{1, n}}, k = 0, 1, 2, \dots$.

Таким чином, остаточно формалізуємо модель (1) у вигляді:

$$\mu_{k+1}(x) = A_k \circ \mu_k(x), k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2)$$

асоціюючи дію операторів $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$, з операціями над відповідними матрицями A_k спеціального виду і векторами $\mu_k(x) = (\mu_k(x_1), \mu_k(x_2), \dots, \mu_k(x_n))^T, k = 0, 1, 2, \dots$. Розглянемо схеми реалізації операції композиції вказаних вище операцій з матрицями $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$, системи (2).

Схема 1. Нехай на k -тому кроці, $k = 0, 1, 2, \dots$, проведене експертне опитування, в рамках якого визначалося співвідношення станів нечіткої системи (1), наприклад, методом парних порівнянь [5]. Припустимо, що для кожного зі станів $x_i, i = \overline{1, n}$, отримано показники $a_{ij}^k, i = \overline{1, n}, j = \overline{1, n}$, що інтерпретуються таким чином: a_{ii}^k задає кількість експертних висновків, які визначають, що система залишається у стані

x_i, a_{ij}^k – кількість голосів, що віддають перевагу стану x_i перед станом x_j . В результаті такої обробки даних отримуємо матрицю $A_k = \{a_{ij}^k\}_{i,j=\overline{1, n}}, k = 0, 1, 2, \dots$.

Використовуючи дії над нечіткими множинами, визначимо:

– операцію додавання двох нечітких елементів (x, μ_1) і (x, μ_2) з X у вигляді:

$$(x, \mu_1) \tilde{+} (x, \mu_2) = (x, \mu_3), \mu_3 = \mu_1 + \mu_2 - \mu_1 * \mu_2, \quad (3)$$

– операцію множення елемента $(x, \mu(x))$ на ціле число:

$$p * \tilde{(x, \mu(x))} = \underbrace{(x, \mu(x)) \tilde{+} (x, \mu(x)) \tilde{+} \dots \tilde{+} (x, \mu(x))}_{p\text{-раз}} \quad (4)$$

Тоді для матриць $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$ заданої структури можна розглядати дискретну систему (2), для якої

$$\mu_{k+1}(x_i) = a_{ii}^k * \tilde{(x_i, \mu_k(x_i))} \tilde{+} \sum_{j \neq i, j=\overline{1, n}}^n a_{ij}^k * \tilde{(x_i, 1 - \mu_k(x_j))}, \quad i = \overline{1, n}. \quad (5)$$

Таким чином, за допомогою формули (5) можна обчислювати зміни значень функції належності елементів $x_i, i = \overline{1, n}$, нечітких множин $\tilde{X}_k = \{(x_1, \mu_k(x_1)), \dots, (x_n, \mu_k(x_n))\}$. Зрозуміло, що в даному випадку значення функції належності кожного елемента залежить від значень функції належності інших елементів, а розрахунок значень співпадає з звичайною схемою множення матриці на вектор з урахуванням введених в (3), (4) операцій з нечіткими елементами.

Розглянуті операції з нечіткими елементами дозволяють моделювати динаміку системи (1), але вони не дають можливості оцінювати вплив співвідношення результатів опитування на розвиток процесу.

Врахування даних опитування в системі (2) і формування елементів матриць $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$, будемо проводити за допомогою методу максимізуючої множини [6], схема якого на кожному кроці матиме наступний вигляд.

Схема 2. Нехай на k -тому кроці, $k = 0, 1, 2, \dots$, за відомих станів системи $x_i, i = \overline{1, n}$, проводиться голосування (опитування) експертів, в результаті якого визначається можливість переходу системи із стану $x_i, i = \overline{1, n}$, у стан $x_j, j = \overline{1, n}$. Кількість голосів, що визначають таку можливість, будемо позначати $a_{ij}^k, i = \overline{1, n}, j = \overline{1, n}$,

$k = 0, 1, 2, \dots$. В результаті отримаємо матриці $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$, моделі (2).

Визначимо правила змін нечітких станів $\tilde{X}_k, k = 0, 1, 2, \dots$ системи (1) за умови наявності інформації про вигляд матриць $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$. Розглянемо довільний крок $k, k = 0, 1, 2, \dots$. Стан системи (як вже було сказано вище) описується нечіткою множиною $\tilde{X}_k = \{x_i, \mu_{\tilde{X}_k}(x_i)\}$, $x_i \in X, i = \overline{1, n}$. Використаємо дані про стан об'єкту і сформуємо нечіткі множини наступного вигляду

$$\tilde{A}_i^k = \{a_{ij}^k, \mu_{\tilde{X}_k}(x_j)\}_{j=\overline{1, n}}, i = \overline{1, n}, k = 0, 1, 2, \dots \quad (6)$$

Означення 2. Максимізуючою множиною $M(Y)$ для множини Y називається нечітка множина, ступінь належності до якої кожного елемента $y \in Y$ відображає, в деякому розумінні, близькість y до $\max Y$.

Розглянемо множину Y , що містить всі значення елементів заданої матриці A

$$Y = \{a_{ij}^k\}_{i, j=\overline{1, n}}. \quad (7)$$

Позначимо $y_{\max} = \max Y$. Визначимо максимізуючі множини для кожного $i = \overline{1, n}$:

$$\tilde{A}_i^{k*} = \{a_{ij}^k, (a_{ij}^k / y_{\max})\}_{j=\overline{1, n}}. \quad (8)$$

На основі перетину нечітких множин $\tilde{A}_i^k$ та $\tilde{A}_i^{k*}$ визначимо нечіткі множини $\tilde{A}_i^{k0}, i = \overline{1, n}, k = 0, 1, 2, \dots$:

$$\tilde{A}_i^{k0} = \{a_{ij}^k, \nu_i^k(x_j)\}_{j=\overline{1, n}}, i = \overline{1, n}. \quad (9)$$

для якої

$$\nu_i^k(x_j) = \begin{cases} \min(\mu_{\tilde{X}_k}(x_i), a_{ii}^k / y_{\max}), & \text{якщо } i = j \\ \min(1 - \mu_{\tilde{X}_k}(x_j), 1 - a_{ij}^k / y_{\max}), & \text{якщо } i \neq j \end{cases}$$

$i = \overline{1, n}, j = \overline{1, n}, k = 0, 1, 2, \dots$

Нечітку множину $\tilde{X}_{k+1} = \{x_i, \mu_{k+1}(x_i)\}_{i=\overline{1, n}}$, де $\mu_{k+1}(x_i) = \max_{j=\overline{1, n}} \nu_i^k(x_j), k = 0, 1, 2, \dots$, будемо вважати наступним значенням нечіткого стану системи (1).

Схема 3. Припустимо, як і в схемі 2, що на k -тому кроці, $k = 0, 1, 2, \dots$, для заданих станів системи $x_i, i = \overline{1, n}$ проводиться голосування про можливість переходу системи із стану $x_i, i = \overline{1, n}$, у стан $x_j, j = \overline{1, n}$. Кількість голосів, що визначають таку можливість, позначимо $a_{ij}^k, i = \overline{1, n}, j = \overline{1, n}, k = 0, 1, 2, \dots$. В результаті маємо

матриці $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$ різницевої системи (1), кожен рядок яких позначатимемо як $\tilde{A}_i^k, i = \overline{1, n}$.

Визначимо n максимізуючих множин $\tilde{A}_i^{k*} = \{a_{ij}^k, (a_{ij}^k / y_{\max})\}_{j=\overline{1, n}}$ у вигляді (8).

Використовуючи аналог формули Байєса, обчислимо величини

$$\nu_i^k(x_j) = \frac{(a_{ij}^k / y_{\max}) \mu_k(x_j)}{\sum_{p=1}^n (a_{ip}^k / y_{\max})^* \mu_k(x_p)},$$

$i = \overline{1, n}, j = \overline{1, n}, k = 0, 1, 2, \dots$ (10)

Нечітку множину $\tilde{X}_{k+1} = \{x_i, \mu_{k+1}(x_i)\}_{i=\overline{1, n}}$, де

$$\mu_{k+1}(x_i) = \max \left(\nu_i^k(x_i), \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq i}}^n \nu_i^k(x_p) \right), \quad (\text{або})$$

$$\mu_{k+1}(x_i) = \max_{j=\overline{1, n}} \nu_i^k(x_j), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \text{ вважатимемо}$$

наступним станом нечіткої системи (1).

Схема 4. Для формалізації міри належності елементів $x_1, \dots, x_n$ до нечітких множин $\tilde{X}$ достатньо конструктивно можна використовувати послідовності простих чисел спеціального вигляду.

Позначимо, $P_j(a)$ - просте число з порядковим номером $j = 0, 1, 2, \dots$, з послідовності простих чисел, що не менше довільного цілого $a \geq 0$. Нескладно перевірити, що справедливі співвідношення

$$1) P_0(0) = 0, P_0(1) = 1, P_1(0) = 1;$$

$$2) P_j(a) = P_1(P_{j-1}(a)) = \dots = P_{j-1}(P_1(a)), a \geq 0, j = 1, 2, 3, \dots;$$

$$3) P_j(a) \leq P_q(a) \text{ для будь-яких } j \leq q, j = 0, 1, 2, \dots, q = 1, 2, 3, \dots$$

На послідовності простих чисел для довільного $P_j(a), a \geq 0, j = 0, 1, 2, \dots$, введемо операцію зсуву на $m, m \in \mathbb{Z}, j + m \geq 0$, простих чисел у вигляді

$$P_j(a) \oplus m = P_{j+m}(a) = P_m(P_j(a)), \quad (11)$$

яка не повинна виводити за межі заданої послідовності ($j + m \geq 0$), та операцію p -кратної композиції ($p \in \mathbb{N}$) відношення двох чисел $P_j(a)$ та $P_q(a), j = 0, 1, 2, \dots, q = 1, 2, 3, \dots, j < q$, у вигляді

$$P_j(a) / P_q(a) \circ p = P_j(a) \oplus p / P_q(a) \oplus p =$$

$$= \frac{P_{j+p}(a)}{P_{q+p}(a)} = \frac{P_p(P_j(a))}{P_p(P_q(a))} \cdot (12)$$

Для визначення величини міри належності задамо два довільні значення номерів u та v , $u \leq v$, $u = 0, 1, 2, \dots$, $v = 1, 2, 3, \dots$, за якими з послідовності простих чисел, що розглядається, знаходяться величини $s = P_u(a)$, $r = P_v(a)$ для деякого простого числа $a \geq 0$. За допомогою відношення цих значень $s/r = P_u(a)/P_v(a)$ можна визначити величину міри належності елементів $x_1, \dots, x_n$ до нечіткої множини $\tilde{X}_k$, $k = 0, 1, 2, \dots$:

$$\mu_k(x_i) = P_{u_i}^k(a) / P_{v_i}^k(a), \quad i = \overline{1, n}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (14)$$

Крім цього, використовуючи операцію p -кратної композиції відношення простих чисел (12) можна запропонувати схему модифікації величини міри належності. Дійсно, якщо модель динаміки ситуації прийняття рішення має вигляд (1), то, розглядаючи в якості A_k , $k = 0, 1, 2, \dots$, векторні $A_k = (a_i^k)_{i=\overline{1, n}}$ або скалярні $A_k = (a_0^k)$, $k = 0, 1, 2, \dots$ цілочислові величини, що визначають збільшення $(a_i^k > 0, i = \overline{0, n})$, зменшення $(a_i^k < 0, i = \overline{0, n})$ або незмінність $(a_i^k = 0, i = \overline{0, n})$ рівнів належності станів системи, динамічний процес можна формалізувати у вигляді

$$\mu_{k+1}(x_i) = A_k \circ \mu_k(x_i), \quad i = \overline{1, n}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (15)$$

де $\mu_{k+1}(x_i) = \mu_k(x_i) \circ a_i^k = P_{u_i}^k(a) / P_{v_i}^k(a) \circ a_i^k$, $u_i + a_i^k \geq 0$, $i = \overline{1, n}$, $k = 0, 1, 2, \dots$, у випадку векторного представлення коефіцієнтів $A_k = (a_i^k)_{i=\overline{1, n}}$, $k = 0, 1, 2, \dots$,

та $\mu_{k+1}(x_i) = \mu_k(x_i) \circ a_0^k = P_{u_i}^k(a) / P_{v_i}^k(a) \circ a_0^k$, $u_i + a_0^k \geq 0$, $i = \overline{1, n}$, $k = 0, 1, 2, \dots$, у випадку скалярного представлення $A_k = (a_0^k)$, $k = 0, 1, 2, \dots$.

Практичне використання наведених схем потребує врахування ряду зауважень щодо їх конструктивності:

1. Як впливає з правил додавання та множення на число (4) при обробці елементів нечітких множин, схема 1 для формалізації процесу динаміки в ситуації прийняття рішень (2) вимагає, щоб матриці $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$, були цілочисельні та невід'ємні. Таке обмеження, з одного боку, звужує діапазон представлення систем (1) і не дозволяє формально використати операцію композиції в повному обсязі, але

природа систем прийняття рішень обумовлює застосування саме таких моделей, а операції (3) та (4) відтворюють один з підходів для забезпечення змін у динаміці ситуацій прийняття рішень.

2. Вхідні дані для схеми 2 також мають вигляд цілочисельних, невід'ємних матриць $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$. Однак, в загальному випадку можна розглядати матриці $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$, для елементів яких справедливо:

$$0 \leq a_{ij}^k \leq 1, \quad i, j = \overline{1, n}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (16)$$

Дійсно, якщо кількість експертів, що визначають можливість переходу системи з стану $x_i, i = \overline{1, n}$, у стан $x_j, j = \overline{1, n}$, позначити N , то замість матриць $A_k, k = 0, 1, 2, \dots$ можна розглядати матриці $\bar{A}_k = \frac{1}{N} A_k, k = 0, 1, 2, \dots$ для яких справедливі умови (11). Відповідні формули (9) та (10) у цьому випадку залишаються без змін.

Список використаних джерел

1. Aliev R.A., Cerkovny A.E., Mamedova G.A. Production management with fuzzy initial information. - M.: Energoatomizdat, 1991. - 244p. (in Russian)
2. Ulianov S.V. Fuzzy models of management systems: theoretical and applied aspects // Izv. Acad. Nauk. Technical cybernetics. - 1991. - №3. - P.56-81. (in Russian)
3. Ivohin E.V., Adzhubey L.T. On approach for the modelling of the fuzzy discrete dynamic systems // Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics & Mathematics. - 2012. - №2. - P.130-133. (in Russian)
4. Ivohin E.V., Volchkov S.A. Qualitative research of fuzzy discrete system dynamics // System Research and Information Technology - 2006. - №1. - P.40-48. (in Ukrainian)
5. Makarov I.M., Vinogradskaya T.M. The theory of choice and decision-making. - M.: Nauka, 1982. - 328p. (in Russian)
6. Borisov A.N. Decision-making based on fuzzy models. - Riga: Zinatne, 1990. - 184p. (in Russian)

Надійшла до редколегії 22.06.201

УДК 517.9

Капустян О.А., к. ф.-м. н.

Дослідження динаміки розв'язків задачі оптимального керування для параболічного рівняння

Досліджується неавтономна нескінченно-вимірна динамічна система, породжена розв'язками задачі оптимального керування для нелінійного параболічного рівняння. Доведено існування pullback атрактора відповідного процесу та досліджено його властивості.

Ключові слова: задача оптимального керування, нелінійне параболічне рівняння, pullback аттрактор.

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4д,
e-mail: olena.kap@gmail.com

O. Kapustian (PhD)

Investigation of solutions dynamics of optimal control problem for parabolic equation

We investigate non-autonomous infinite-dimensional dynamical system, generated by solutions of optimal control problem for nonlinear parabolic equation. We prove the existence of pullback attractor for corresponding process and we investigate its properties.

Key Words: optimal control problem, nonlinear parabolic equation, pullback attractor.

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: olena.kap@gmail.com

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Хусаїнов Д.Я.

Як відомо, задачі оптимального керування еволюційними системами є неавтономними і можуть бути описані в термінах динамічних процесів [1, 2]. Динаміку таких об'єктів описують у термінах pullback атракторів [3, 4]. Існування такого pullback атрактора для екстремальної задачі на розв'язках 3D системи Нав'є-Стокса було доведено в [5]. У даній роботі вивчається динаміка розв'язків задачі оптимального керування для нелінійного параболічного рівняння з квадратичним критерієм якості. Встановлюється, що за певних умов на множину допустимих керувань оптимальні розв'язки породжують динамічний процес, який має у фазовому просторі рівномірно обмежений pullback аттрактор.

Постановка задачі

Розглядається задача

$$\begin{cases} \frac{\partial y}{\partial t} = \Delta y + f(y) + u(t, x), & t > \tau, x \in \Omega, \\ y|_{\partial\Omega} = 0, y|_{t=\tau} = y_\tau(x), \end{cases} \quad (1)$$

$$u \in U_\tau \subset L^2(\tau, +\infty; L^2(\Omega)), \quad (2)$$

$$J_\tau(y, u) = \int_\tau^{+\infty} \int_\Omega (y^2(t, x) + u^2(t, x)) dx dt \rightarrow \inf. \quad (3)$$

Нехай при певних умовах $\forall \tau \in R \quad \forall y_\tau \in L^2(\Omega)$ задача оптимального керування (1)-(3) має принаймні один розв'язок $\{\tilde{y}, \tilde{u}\}$. Тоді динаміка еволюційної задачі (1)-(3) визначається відображенням

$$U(t, \tau, y_\tau) = \{\tilde{y}(t) | \tilde{y} - \text{оптимальна траєкторія} \quad (1)-(3), \tilde{y}(\tau) = y_\tau\}. \quad (4)$$

В роботі доводиться, що за виконання принципу оптимальності Беллмана формула (4) породжує процес, який має у фазовому просторі $L^2(\Omega)$ рівномірно обмежений pullback аттрактор.

Встановлення розв'язності задачі (1)-(3)

Вважаємо виконаними наступні умови:

$$f \in C(R), |f(y)| \leq C_1|y|, f'(y) \geq -C_2, \quad (5)$$

$$\forall \tau \in R, U_\tau - \text{замкнена, опукла, } 0 \in U_\tau,$$

$$\text{якщо } s > \tau, \text{ то для } u \in U_\tau \quad u|_{[s, +\infty)} \in U_s, \quad (6)$$

$$\text{якщо } s > \tau, \tilde{u} \in U_\tau, \bar{u} \in U_s, \text{ то}$$

$$u(t) = \begin{cases} \tilde{u}(t), & t \in [\tau, s], \\ \bar{u}(t), & t > s \end{cases} \in U_\tau. \quad (7)$$

За умов (5) відомо [6], що $\forall u \in U_\tau, \forall y_\tau \in L^2(\Omega)$ задача (1) має єдиний узагальнений розв'язок на

$[\tau, +\infty)$, причому $y \in C([\tau, +\infty); L^2(\Omega))$ і майже скрізь (м. с.) задовольняє енергетичну рівність

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|y(t)\|^2 + \|y(t)\|_{H_0^1}^2 = (f(y), y) + (u, y), \quad (8)$$

де тут і надалі $\|\cdot\|$ і $(\cdot, \cdot)$ означають норму і скалярний добуток в $L^2(\Omega)$.

Лема 1. Нехай

$$C_1 < \lambda_1, \quad (9)$$

де $\lambda_1 > 0$ - перше власне число оператора $-\Delta$ у просторі $H_0^1(\Omega)$. Тоді задача (1) - (3) має розв'язок для $\forall y_\tau \in L^2(\Omega)$.

Доведення. З рівності (8) для допустимого процесу $\{y, u\}$ маємо:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|y(t)\|^2 + \|y(t)\|_{H_0^1}^2 \leq C_1 \|y\|^2 + \|u\| \cdot \|y\|. \quad (10)$$

В силу (9) і нерівності Пуанкаре $\exists \delta > 0 \exists C_3 > 0$:

$$\frac{d}{dt} \|y(t)\|^2 + \delta \|y(t)\|^2 \leq C_3 \|u(t)\|^2. \quad (11)$$

Звідси $\forall t \geq s \geq \tau$

$$\|y(t)\|^2 \leq \|y(s)\|^2 e^{-\delta(t-s)} + C_3 \int_s^t \|u(p)\|^2 \cdot e^{-\delta(t-p)} dp, \quad (12)$$

$$\int_s^t \|y(p)\|^2 dp \leq \frac{1}{\delta} \left(\|y(s)\|^2 + C_3 \int_s^t \|u(p)\|^2 dp \right). \quad (13)$$

Звідси, зокрема, маємо, що для довільного допустимого процесу $\{y, u\}$ функціонал $J_\tau(y, u) < \infty$.

Нехай J_τ - значення задачі (1) - (3), $\{y_n, u_n\}$ - мінімізуюча послідовність допустимих пар така, що

$$J_\tau(y_n, u_n) \leq J_\tau + \frac{1}{n}. \quad (14)$$

Тоді $\{u_n\}$ - обмежені в $L^2(\tau, +\infty; L^2(\Omega))$, $\{y_n\}$ - обмежені в $L^2(\tau, +\infty; H_0^1(\Omega))$, $\left\{ \frac{\partial y_n}{\partial t} \right\}$ - обмежені в $L^2(\tau, +\infty; H^{-1}(\Omega))$. Отже, для деякої пари $\{\tilde{y}, \tilde{u}\}$ по підпослідовності

$$\begin{aligned} u_n &\xrightarrow{w} \tilde{u} \text{ в } L^2(\tau, +\infty; L^2(\Omega)), \\ y_n &\xrightarrow{w} \tilde{y} \text{ в } L^2(\tau, +\infty; H_0^1(\Omega)), \\ \frac{\partial y_n}{\partial t} &\xrightarrow{w} \frac{\partial \tilde{y}}{\partial t} \text{ в } L^2(\tau, +\infty; H^{-1}(\Omega)), \end{aligned} \quad (15)$$

і за лемою про компактність [6] $\forall T > \tau$

$$\begin{aligned} y_n &\rightarrow \tilde{y} \text{ в } L^2(\tau, T; L^2(\Omega)), \\ y_n(t, x) &\rightarrow \tilde{y}(t, x) \text{ м.с.} \end{aligned} \quad (16)$$

Тоді за теоремою Лебега $f(y_n) \rightarrow f(\tilde{y})$ в $L^2(\tau, T; L^2(\Omega))$, отже, $\tilde{y}$ - розв'язок задачі (1) з керуванням $\tilde{u}$ і оскільки $\tilde{u} \in U_\tau$, то $\{\tilde{y}, \tilde{u}\}$ - допустимий процес у задачі (1) - (3). При цьому з нерівності (14) в силу слабкої збіжності

$$J_\tau(\tilde{y}, \tilde{u}) \leq \liminf J_\tau(y_n, u_n) \leq J_\tau,$$

що і означає оптимальність процесу $\{\tilde{y}, \tilde{u}\}$. Лему доведено.

Лема 2. Відображення (4) визначає неавтономну динамічну систему (процес), тобто $\forall \tau \in R \quad \forall y_\tau \in L^2(\Omega)$:

$$1) U(\tau, \tau, y_\tau) = y_\tau;$$

$$2) U(t, \tau, y_\tau) = U(t, s, U(s, \tau, y_\tau)) \quad \forall t \geq s \geq \tau.$$

Доведення. Умова 1) очевидна. Нехай $\xi \in U(t, \tau, y_\tau)$. Тоді $\xi = \tilde{y}(t)$, де $\{\tilde{y}, \tilde{u}\}$ - оптимальний процес в (1) - (3) на $[\tau, +\infty)$, $\tilde{y}(\tau) = y_\tau$, $\tilde{u} \in U_\tau$. Тоді $\tilde{y}(s) \in U(s, \tau, y_\tau) \quad \forall s \in (\tau, t)$.

Доведемо включення

$$\tilde{y}(t) \in U(t, s, \tilde{y}(s)), \quad (17)$$

що еквівалентне принципу оптимальності Беллмана. Запишемо рівність

$$\tilde{J}_\tau = J_\tau(\tilde{y}, \tilde{u}) = \int_\tau^s (\|\tilde{y}\|^2 + \|\tilde{u}\|^2) dt + \int_s^{+\infty} (\|\tilde{y}\|^2 + \|\tilde{u}\|^2) dt \quad (18)$$

і розглянемо задачу (1) - (13) на проміжку $[s, +\infty)$ з початковими даними $(s, \tilde{y}(s))$, допустимою множиною керувань U_s і функціоналом J_s . Якщо звуження $\{\tilde{y}, \tilde{u}\}$ на $[s, +\infty)$ не є оптимальним процесом в такій задачі, то для її розв'язку $\{\bar{y}, \bar{u}\}$ (існування якого гарантує Лема 1) маємо нерівність

$$\int_s^{+\infty} (\|\bar{y}\|^2 + \|\bar{u}\|^2) dt < \int_s^{+\infty} (\|\tilde{y}\|^2 + \|\tilde{u}\|^2) dt. \quad (19)$$

Розглянемо керування

$$u(t) = \begin{cases} \tilde{u}(t), & t \in [\tau, s], \\ \bar{u}(t), & t \geq s, \end{cases}$$

що в силу (6) належить U_τ . Тоді

$$y(t) = \begin{cases} \tilde{y}(t), & t \in [\tau, s], \\ \bar{y}(t), & t \geq s \end{cases}$$

є розв'язком задачі (1), який відповідає керуванню u . Отже,

$$J_\tau = \int_\tau^s (\|\tilde{y}\|^2 + \|\tilde{u}\|^2) dt + \int_s^{+\infty} (\|\bar{y}\|^2 + \|\bar{u}\|^2) dt \geq \tilde{J}_\tau,$$

тобто в силу $\int_s^{+\infty} (\|\bar{y}\|^2 + \|\bar{u}\|^2) dt \geq \int_s^{+\infty} (\|\tilde{y}\|^2 + \|\tilde{u}\|^2) dt$, що суперечить нерівності (19).

Таким чином, одержуємо (17), звідки маємо, що $U(t, \tau, y_\tau) \subset U(t, s, U(s, \tau, y_\tau))$.

Тепер нехай $\xi \in U(t, s, U(s, \tau, y_\tau))$. Тоді $\xi = \tilde{y}_2(t)$, $\{\tilde{y}_2, \tilde{u}_2\}$ є оптимальним процесом в задачі (1) - (3) на $[s, +\infty)$ з $\tilde{y}_2(s) = y_s$, $\tilde{u}_2 \in U_s$ і $y_s = \tilde{y}_1(s)$, де $\{\tilde{y}_1, \tilde{u}_1\}$ - оптимальний процес в задачі (1) - (3) на $[\tau, +\infty)$ з $\tilde{y}_1(\tau) = y_\tau$. Розглянемо керування

$$u(t) = \begin{cases} \tilde{u}_1(t), & t \in [\tau, s], \\ \tilde{u}_2(t), & t \geq s \end{cases} \in U_\tau$$

і відповідну траєкторію

$$y(t) = \begin{cases} \tilde{y}_1(t), & t \in [\tau, s], \\ \tilde{y}_2(t), & t \geq s, \end{cases}$$

що є розв'язком задачі (1) - (3) на $[\tau, +\infty)$ з керуванням u . Крім того, оскільки звуження $\{\tilde{y}_1, \tilde{u}_1\}$ на $[s, +\infty)$ є допустимим процесом в задачі (1) - (3) на $[s, +\infty)$ внаслідок умови (6), то

$$J_\tau(y, u) = \int_\tau^s (\|\tilde{y}_1\|^2 + \|\tilde{u}_1\|^2) dt + \int_s^{+\infty} (\|\tilde{y}_2\|^2 + \|\tilde{u}_2\|^2) dt \geq J_\tau(y_1, u_1).$$

Отже, $\{y, u\}$ - оптимальний процес в задачі (1) - (3). Лему доведено.

Доведення існування pullback атрактору

Означення [4]. Pullback-атрактором процесу U називається сім'я компактних множин $\{\Theta(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ така, що:

- 1) $\forall t \in \mathbb{R} \quad \forall$ обмеженої $B \subset L^2(\Omega)$
 $\text{dist}(U(t, s, B), \Theta(t)) \rightarrow 0, s \rightarrow -\infty;$ (20)
- 2) $U(t, s, \Theta(s)) = \Theta(t) \quad \forall t \geq s;$
- 3) $\Theta(t)$ є мінімальною замкнутою множиною, яка задовольняє умову (20).

Основним результатом роботи є наступна теорема.

Теорема. Нехай виконані умови (5)–(7), (9) і

$$\exists \alpha > 0 \quad \forall \tau \in \mathbb{R} \quad \forall u \in U_\tau \quad \|u(t)\| \leq \alpha \quad \text{для майже всіх } t \geq \tau. \quad (21)$$

Тоді процес (4) має pullback-атрактор $\{\Theta(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$, причому $\exists R_0 > 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}$

$$\Theta(t) \subset B_{R_0} = \{y \in L^2(\Omega) \mid \|y\| \leq R_0\}. \quad (22)$$

Доведення.

Покладемо $V_\tau = U_\tau \cap \{u \in L^2(\tau, +\infty; L^2(\Omega)) \mid \|u(t)\| \leq \alpha \text{ для м. в. } t > \tau\}$. Легко показати, що V_τ замкнена, опукла і задовольняє умови (6), (7). Тож надалі будемо розглядати задачу (1) - (3) з множиною

допустимих керувань V_τ . При цьому слід зауважити, що V_τ не є обмеженою в $L^2(\tau, +\infty; L^2(\Omega))$.

Нехай $\tilde{y}(t) \in U(t, \tau, y_\tau)$, $\tilde{u} \in V_\tau$ - відповідне оптимальне керування. З оцінки (12) для $\|y_\tau\| \leq R$ маємо:

$$\|\tilde{y}(t)\|^2 \leq R^2 e^{-\delta(t-\tau)} + C_3 \cdot \frac{\alpha^2}{\delta}. \quad (23)$$

Таким чином, для $R_0^2 := 1 + C_3 \frac{\alpha^2}{\delta}$ маємо:

$$\forall R > 0 \quad \exists s = s(R) > 0 \quad \forall \tau \in \mathbb{R} \quad U(s + \tau, \tau, B_R) \subset B_{R_0} \quad \forall s \geq s(R). \quad (24)$$

З (24) випливає, якщо $\Theta(t)$ задовольняє умову (20), то $\Theta(t) \subset B_{R_0}$. Оскільки $\forall \tau \leq \tau(R) \quad \forall t \in \mathbb{R}$

$$U(t, \tau, B_R) \subset U(t, t-1, U(t-1, \tau, B_R)) \subset U(t, t-1, B_{R_0}), \quad (25)$$

то набір множин $\{K(t) = \overline{U(t, t-1, B_{R_0})}\}_{t \in \mathbb{R}}$ задовольняє (20). Тоді з [4] для доведення теореми достатньо встановити компактність $K(t)$ та замкненість графіка відображення $y \mapsto U(t, \tau, y)$.

Отже, нехай $\{\eta_n\} \subset B_{R_0}$ і $\xi_n \in U(t, \tau, \eta_n)$. Тоді $\xi_n = \tilde{y}_n(t)$, $\tilde{y}_n(\tau) = \eta_n$, $\{\tilde{y}_n, \tilde{u}_n\}$ - оптимальний процес в задачі (1) - (3), $\tilde{u} \in V_\tau$.

В силу оптимальності

$$J_\tau(\tilde{y}_n, \tilde{u}_n) \leq J_\tau(y_n, 0) = \int_\tau^{+\infty} \|y_n(t)\|^2 dt, \quad (26)$$

де y_n - розв'язок задачі (1), $y_n(\tau) = \eta_n$, з керуванням $u = 0$. З нерівності (13) одержимо

$$\int_\tau^{+\infty} \|y_n(t)\|^2 dt \leq \frac{1}{\delta} \|\eta_n\|^2 \leq \frac{R_0^2}{\delta},$$

тож для деякої допустимої пари $\{\tilde{y}, \tilde{u}\}$ виконуються збіжності (15), (16), що, зокрема, в силу [6] означає, що

$$\forall t > \tau \quad \tilde{y}_n(t) \rightarrow y(t) \text{ в } L^2(\Omega). \quad (27)$$

Отже, $\{\xi_n\}$ - предкомпактна і компактність $K(t)$ доведена.

Тепер нехай $\xi_n \in U(t, \tau, \eta_n)$, $\eta_n \rightarrow \eta$, $\xi_n \rightarrow \xi$. Доведемо, що $\xi \in U(t, \tau, \eta)$. Аналогічно попереднім міркуванням для послідовності $\xi_n = \tilde{y}_n(t)$ з керуванням $\tilde{u}_n$, існує допустима пара $\{\tilde{y}, \tilde{u}\}$ така, що виконуються збіжності (15), (16),

(27), причому $\tilde{y}_n(\tau) = \eta_n \rightarrow \tilde{y}(\tau) = \eta$ в $L^2(\Omega)$.

Доведемо, що $\{y, u\}$ - оптимальний процес в задачі (1) - (3). Візьмемо довільне $u \in V_\tau$. Нехай y_n - розв'язок задачі (1) з керуванням u і $y_n(\tau) = \eta_n$. Тоді y_n збігається до деякого y у сенсі збіжностей (15), (16), (27), причому $y(\tau) = \eta$, і $\{y, u\}$ - допустима пара в задачі (1) - (3). З принципу оптимальності Беллмана випливає, що $\forall T > \tau$ процес $\{\tilde{y}_n, \tilde{u}_n\}$ є оптимальним в (1) - (3) з початковими даними $(T, \tilde{y}_n(T))$, отже,

$$\int_T^{+\infty} (\|\tilde{y}_n(t)\|^2 + \|\tilde{u}_n(t)\|^2) dt \leq \int_T^{+\infty} \|p_n(t)\|^2 dt, \quad (28)$$

де p_n - розв'язок задачі (1) з початковими даними $(T, \tilde{y}_n(T))$ і керуванням $u = 0$. Тоді внаслідок нерівності (13)

$$\int_T^{+\infty} \|p_n(t)\|^2 dt \leq \frac{1}{\delta} \|\tilde{y}_n(T)\|^2. \quad (29)$$

Також з нерівності (13)

$$\int_T^{+\infty} \|y_n(t)\|^2 dt \leq \frac{1}{\delta} \left(\|y_n(T)\|^2 + C_3 \int_T^{+\infty} \|u(t)\|^2 dt \right). \quad (30)$$

Тоді з нерівності $J_\tau(\tilde{y}_n, \tilde{u}_n) \leq J_\tau(y_n, u)$ матимемо

$$\int_\tau^T (\|\tilde{y}_n(t)\|^2 + \|\tilde{u}_n(t)\|^2) dt \leq \int_\tau^T \|y_n(t)\|^2 dt + \int_\tau^{+\infty} \|u(t)\|^2 dt +$$

$$+ \frac{1}{\delta} \left(\|y_n(T)\|^2 + C_3 \int_T^{+\infty} \|u(t)\|^2 dt \right). \quad (31)$$

Отже,

$$\int_\tau^T (\|\tilde{y}(t)\|^2 + \|\tilde{u}(t)\|^2) dt \leq \int_\tau^T \|y(t)\|^2 dt + \int_\tau^{+\infty} \|u(t)\|^2 dt +$$

$$+ \frac{1}{\delta} \left(\|y(T)\|^2 + C_3 \int_T^{+\infty} \|u(t)\|^2 dt \right),$$

і при $T \rightarrow \infty$ $J_\tau(\tilde{y}, \tilde{u}) \leq J_\tau(y, u)$.

Таким чином, $\{\tilde{y}, \tilde{u}\}$ - оптимальний процес в задачі (1) - (3) і $\xi_n = \tilde{y}_n(\tau) \rightarrow \tilde{y}(\tau) = \xi \in U(\tau, \eta)$. Теорему доведено.

Висновки

У даній роботі вивчена динаміка розв'язків задачі оптимального керування для нелінійного параболического рівняння з квадратичним критерієм якості. Встановлено, що за певних умов на множину допустимих керувань оптимальні розв'язки породжують динамічний процес, який має у фазовому просторі рівномірно обмежений pullback аттрактор.

Список використаних джерел

1. Hale J.K. Asymptotic behavior of dissipative systems. - AMS, Providence, 1988. - 224p.
2. Zgurovsky M.Z., Mel'nik V.S. Nonlinear analysis and control of physical processes. - Springer, Berlin, 2004. - 304p.
3. Haraux A. Attractors of asymptotically compact processes and applications to nonlinear PDE // Partial Differential Equations. - 1988. Volume 13. - PP. 1383 - 1414.
4. Karaballo T., Langa J.A., Mel'nik V.S., Valero J. Pullback attractors of nonautonomous and stochastic multivalued dynamical systems //

Set-Valued Analysis. - 2003. - № 11. - PP.153-201.

5. Kapustyan O.V., Kasyanov P.O., Valero J. Pullback attractors for a class of extremal solutions of the 3D Navier-Stokes system // Journal of Math. Analysis and Applications. - 2011. - 373. - PP. 535 - 547.

6. Kapustyan O.V., Kapustian O.A., Sukretna A.V. Approximate bounded synthesis for distributed systems. - LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, Germany, 2013. - 223 p. (electronic version ISBN 978-3-659-32021-7).

Надійшла до редколегії 01.11.13

Двоїста до (1)–(3) може бути записана у вигляді:

$$\min Bu, A^T u \geq C^T, u \geq 0, u = (u_1, u_2, \dots, u_m)^T.$$

Матрична гра у змішаних стратегіях подається як двоїста пара задач лінійного програмування [1-3],

$$\text{де } x_j \geq 0, j = \overline{1, n}, c_j = 1, j = \overline{1, n}.$$

Задача (4)–(6) є двоїстою до задачі (1)–(3), яку називають прямою. Поняття двоїстості є взаємним.

Перетворимо задачі до канонічного вигляду введенням додаткових обмежень та поставимо обмеження кожної задачі у відповідність змінні її двоїстої задачі, а саме:

$$A_x x' = B^T,$$

$$x' \geq 0,$$

$$\text{де } x' = (\underbrace{x_1, x_2, \dots, x_n}_x, x_{n+1}, \dots, x_{n+m})^T,$$

$$A_x' = \left\{ \begin{array}{cccc} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & 1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \underbrace{a_{m1} \ a_{m2} \ \dots \ a_{mn}}_A & \underbrace{\phantom{a_{m1} \ a_{m2} \ \dots \ a_{mn}}}_{E} & 1 \end{array} \right\}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n + x_{n+1} = b_1; \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n + x_{n+2} = b_2; \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n + x_{n+m} = b_m. \end{array} \right| \begin{array}{l} u_1 \\ u_2 \\ \dots \\ u_m \end{array}$$

Аналогічно:

$$A_u^T u' = C^T,$$

$$u' \geq 0,$$

$$u' = (\underbrace{u_1, u_2, \dots, u_m}_x, u_{m+1}, \dots, u_{n+m})^T,$$

$$A_u' = \left\{ \begin{array}{cccc} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{m1} & -1 \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{m2} & -1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \underbrace{a_{1n} \ a_{2n} \ \dots \ a_{mn}}_{A^T} & \underbrace{\phantom{a_{1n} \ a_{2n} \ \dots \ a_{mn}}}_{E_n} & -1 \end{array} \right\}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}u_1 + a_{21}u_2 + \dots + a_{m1}u_m - u_{m+1} = c_1; \\ a_{12}u_1 + a_{22}u_2 + \dots + a_{m2}u_m - u_{m+2} = c_2; \\ \dots \\ a_{1n}u_1 + a_{2n}u_2 + \dots + a_{mn}u_m - u_{m+n} = c_n. \end{array} \right| \begin{array}{l} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{array}$$

$$u \geq 0$$

Пасивність та неактивність стовпців моделі лінійного програмування (1)–(3).

Нехай

$$X = \left\{ x / \sum_{j=1}^n A_j x_j \leq B, x \geq 0 \right\}$$

$$X_r = \left\{ x / \sum_{j=1, j \neq r}^n A_j x_j \leq B, x \geq 0 \right\}$$

Визначення 1. Стовпець A_r ($x_r = 0$) задачі (1)–(3) пасивний, якщо $X = X_r$.

Аналогічно означення пасивності стовпця можна ввести і для задачі (4)–(6).

Теорема 1. (друга теорема двоїстості для канонічної задачі [4]). Для того, щоб плани X^* та U^* відповідних спряжених задач були оптимальними, необхідно і достатньо, щоб виконувалися умови доповнюючої нежорсткості:

$$x_j^* \left(\sum_{i=1}^m a_{ij} u_i^* - c_j \right) = 0, j = \overline{1, n}$$

$$u_i^* \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^* - b_i \right) = 0, i = \overline{1, m}.$$

Очевидніший взаємозв'язок між оптимальними планами прямої та двоїстої задач встановлює наслідок другої теореми двоїстості.

Наслідок 1. Якщо в результаті підстановки оптимального плану однієї із задач (прямої чи двоїстої) в систему обмежень цієї задачі i -те обмеження виконується як строга нерівність, то відповідна i -та компонента оптимального плану (відповідна стовпцю A_i) спряженої задачі дорівнює нулю.

Якщо i -та компонента оптимального плану однієї із задач додатна (при стовпцю A_i), то відповідне i -те обмеження спряженої задачі виконується для оптимального плану як рівняння.

Оскільки оптимальні стратегії матричної гри визначаються через компоненти розв'язки задач (1)–(3) та (4)–(6) [1], саме складові оптимальних

стратегій u'_i та w'_i ігри пов'язані з компонентами u_i та x_j оптимальних планів двоїстих задач лінійного програмування формулами

$$w'_j = x_j / \sum_{j=1}^n x_j, \quad u'_i = u_i / \sum_{i=1}^m u_i,$$

то наведені вище умови пасивності тісно пов'язані з категорією суттєвості чистої стратегії матричної гри.

Означення 4. Чиста стратегія

$$e_k = \left(\underbrace{0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0}_m \right) \quad \text{першого гравця}$$

називається *істотною (суттєвою)*, якщо існує така оптимальна змішана стратегія

$$u' = \left(u_1, u_2, \dots, u_{k-1}, \underbrace{u_k}_k, u_{k+1}, \dots, u_m \right), \quad \text{в якій } k\text{-а її}$$

складова u_k додатня. В іншому випадку стратегія e_k *неістотна (несуттєва)*.

Аналогічно визначаються чисті

$$e_k = \left(\underbrace{0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0}_n \right) \quad \text{суттєві і несуттєві}$$

стратегії другого гравця

$$w' = \left(w_1, w_2, \dots, w_{k-1}, \underbrace{w_k}_k, w_{k+1}, \dots, w_n \right).$$

Мають місце такі властивості оптимальних стратегій матричної гри:

Чиста стратегія e_k гравця є суттєвою в тому і тільки в тому випадку, якщо на ній досягається ціна гри при довільній оптимальній стратегії противника. Іншими словами, необхідною і достатньою умовою того, щоб чиста стратегія e_k першого гравця була суттєвою, є виконання рівності $e_k A w = v$ для всіх оптимальних стратегій другого гравця, де v ціна гри.

Якщо стратегія e_k не є істотною, то завжди знайдеться оптимальна стратегія w' другого гравця, яка гарантує строгу нерівність $e_k A w < v$

Це вказує на потребу проведення аналізу структурних властивостей системи обмежень (2)-(3) задачі. Наприклад, для розв'язування задачі симплекс-методом [5-6] необхідно звести задачі до канонічної форми, для чого в системі обмежень задач необхідно ввести m невід'ємних змінних.

Введемо згідно [4] основні означення.

Означення 5. Квадратну матрицю A_0 , утворену перетином l лінійно незалежних рядків $a_{i_1}, a_{i_2}, \dots, a_{i_r} \quad (i_1, i_2, \dots, i_r) = I_0 \subset I$ та стовпців $A_{j_1}, A_{j_2}, \dots, A_{j_r} \quad (j_1, j_2, \dots, j_r) = J_0 \subset J$ (1), будемо називати базисною, а розв'язок $x_0 = (x_{j_1}, x_{j_2}, \dots, x_{j_r})$ відповідної їм системи рівнянь $A_0 x_0 = B_0$ базисним.

Означення 6. Дві базисні матриці з одним відмінним рядком чи стовпцем будемо називати суміжними.

Базисні матриці в ході ітерацій МБМ [5] послідовно змінюються заміщенням рядків, а модифікований симплекс-метод (МСМ) [4] – заміщенням стовпців. Нехай e_{r_i} – елементи матриці A_0^{-1} , оберненої до A_0 $\alpha_r = (\alpha_{r_1}, \alpha_{r_2}, \dots, \alpha_{r_m})$ – вектор розвинення a_r за рядками базисної матриці A_0 , $x_j = (x_{j_1}, x_{j_2}, \dots, x_{j_m})$ вектор розвинення стовпця A_r , $r \in J$ за стовпцями базисної матриці A_0 . Введені вектори та їх елементи для МДБМ та МСМ (коефіцієнти розвинення нормалей обмежень, коефіцієнти оберненої матриці для суміжної “наступної” базисної матриці будемо позначати ризикою зверху, тобто $\bar{\alpha}_r$, $\bar{e}_{r_i}$, $\bar{\alpha}_0$.

Теорема 2. [5] Між коефіцієнтами розвинення нормалей обмежень (5) за рядками базисної матриці, елементами обернених матриць в двох суміжних базисних матрицях мають місце такі співвідношення

$$\bar{\alpha}_{rk} = \frac{\alpha_{rk}}{\alpha_{lk}}, \quad \bar{\alpha}_{ri} = \alpha_{ri} - \frac{\alpha_{rk}}{\alpha_{lk}} \alpha_{li}, \quad r = \overline{0, n}; \quad i = \overline{1, m}; \quad i \neq k; \quad (7)$$

$$\bar{e}_{rk} = \frac{e_{rk}}{\alpha_{lk}}, \quad \bar{e}_{ri} = e_{ri} - \frac{e_{rk}}{\alpha_{lk}} \alpha_{li}, \quad r = \overline{1, m}; \quad i = \overline{1, m}; \quad i \neq k; \quad (8)$$

причому умовою невідродженості базисної матриці при заміщенні нормаллю a_l k -го рядка базисної матриці A_0 є виконання $\alpha_{lk} \neq 0$.

Теорема 3. [4] Між коефіцієнтами розвинення стовпців (2) за стовпцями базисної матриці, елементами обернених матриць в двох суміжних базисних матрицях мають місце такі співвідношення

$$\bar{x}_{ij} = \frac{x_{rj}}{x_{rs}}, \quad \bar{x}_{kj} = x_{kj} - \frac{x_{rj}}{x_{rs}} x_{ks}, \quad k = \overline{1, m};$$

$$j = \overline{1, m}; \quad r \neq k; \quad (8)$$

$$\bar{e}_{rj} = \frac{e_{rj}}{x_{rs}}, \quad \bar{e}_{kj} = e_{kj} - \frac{e_{rj}}{x_{rs}} x_{ks}, \quad k = \overline{1, m};$$

$$j = \overline{1, m}; \quad r \neq k; \quad (9)$$

причому умовою: невинорженості базисної матриці при заміщенні стовпцем A_s r -го стовпця базисної матриці A_0 є виконання $x_{rs} \neq 0$.

Умови наведених теорем є фрагментами більш загальних положень МДБМ, МСМ з якими можна ознайомитись в [4,5], причому A_0^T задачі (1)-(3) є A_0 задачі (4)-(6).

Нехай відомі ранг матриці A та базисна матриця A_0 (5).

Теорема 4. Для того, щоб обмеження $a_r u^T \leq c_r$ було пасивним, необхідно і достатньо існування базисної матриці A_0 , відносно якої компоненти вектору розвинення $\alpha_{rk} \geq 0$ для всіх k ($x_{rs} \geq 0, s = \overline{1, m}$ для A_0^T).

Теорема 6. Для того, чиста стратегія r другого гравця при платіжній матриці A була несуттєвою $x_r = 0$, необхідно і достатньо щоб обмеження $a_r u^T \leq c_r$ було пасивним (щоб існувала базисна матриця A_0 , відносно якої компоненти вектору розвинення $\alpha_{rk} \geq 0$ для всіх k).

Доведення. Згідно умов теорем 1 про доповнюючу нежорсткість виконуються

$$\text{співвідношення } x_j^* \times \left(\sum_{i=1}^m a_{ij} u_i^* - c_j \right) = 0, \quad j = \overline{1, n}$$

$$\text{та } u_i^* \times \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^* - b_i \right) = 0, \quad i = \overline{1, m}. \text{ При виконанні}$$

умови пасивності для обмеження (4) двоїстої задачі (4)-(6) буде виконання $\sum_{i=1}^m a_{ij} u_i^* - c_j < 0$,

$\forall u \in U$ ($u^* = (u_1^*, u_2^*, \dots, u_m^*) \in U$). Звідки витікає, що $x_j^* = 0$. При виконанні умови пасивності для обмеження (2) прямої задачі (1)-(3) $\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^* - b_i < 0$, $\forall x \in X$ ($x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) \in X$).

Звідки витікає, що $u_i^* = 0$. Навпаки з рівності $x_j^* = 0$ чи $u_i^* = 0$ (при оптимальності та виконанні умов (2)-(3) та (5)-(6)) витікає з теореми, що $\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^* - b_i < 0$ та $\sum_{i=1}^m a_{ij} u_i^* - c_j < 0$ та пасивність.

Висновок

Умови пасивності та необмеженості обмежень (5) задачі (4)-(6) встановлені в середовищі МБМ дозволяють застосуванням теореми про доповнюючу нежорсткість визначати неактивні та пасивні стовпці (2) задачі (1)-(3).

Враховуючи зв'язок компонент розв'язків двоїстої та прямої задач з компонентами оптимальних стратегій гравців можна встановлювати несуттєвість чистих стратегій гравців, тобто про структурні властивості платіжної матриці гри.

Список використаних джерел

1. Golshteyn E.G., Yudin D.B. New directions in linear programming. – М. – Sovetskoe radio, – 1969. – 524p. (in Russian).
2. Dantzig G.B Linear programming and application. М.: Progress, – 1966. – 356 p. (in Russian).
3. Dantzig G.B., Thapa M.N. Linear Programming 1: introduction, Springer, – 1997. – 435p.
4. Golshteyn E.G., Yudin D.B. Linear programming/.Theory and methods. –М.: Nauka, – 1963. – 776p. (in Russian).
5. Kudin V. I., Lyashko S.I., Khritonenko N.V., Yatsenko Yu.P. Analysis of the properties of a linear system using the method of artificial basis matrices // Kibernetika i sistemny analiz. — 2007. — N 4. —.P. 119–127 (in Ukrainian).

Надійшла до редколегії 19.04.13

УДК 519.23

Литвиненко І. О.¹, аспірант,
Лебедєв Є. О.², д.ф.-м.н., проф.

Оптимізація системи обслуговування з багатьма виконавцями та з рекурентним потоком заявок різних типів

В роботі розглядається система обслуговування з багатьма виконавцями до якої надходять заявки, що потребують різного часу виконання. Час обслуговування вважається експоненціально розподіленим з параметром, що залежить від типу заявки. Вхідний потік вважається довільним рекурентним потоком заявок.

В результаті було описано спосіб знаходження стаціонарних ймовірностей процесу обслуговування та наведено приклад оптимізації параметрів вхідних потоків системи з метою ефективного завантаження наявних виконавців.

Ключові слова: система обслуговування, рекурентний потік, стаціонарні ймовірності.

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т Глушкова 4д, e-mail: igor@ert.org.ua

²Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т Глушкова 4д, e-mail: leb@unicyb.kiev.ua

Статтю представив д. т. н. Заславський В. А.

Розглянемо систему обслуговування з M виконавцями та одним потоком заявок, який є потоком відновлення, де інтервали часу між заявками мають функцію розподілу $F(x)$. Кожна заявка з ймовірністю p_i ($i = 1, 2$) потребує для обробки одного виконавця на експоненціально розподілений час з параметром μ_i . Якщо всі M виконавців зайняті, заявка отримує відмову в обслуговуванні та губиться.

Випадок з одним типом заявок розглянуто на роботі [1]. Випадок з різними заявками але з пуассонівським потоком на вході розглянуто в роботі [2]. В даній роботі узагальнюється результат роботи [1] на випадок двох типів заявок, що потребують різних середній час для обслуговування. Опишемо роботу цієї системи випадковим процесом

$$X(t) = (X_1(t), X_2(t)) \\ \in \{(x_1, x_2) : x_1 + x_2 \leq M, x_1, x_2 = \overline{0, M}\},$$

I. O. Lytvynenko¹, PhD student,
E. O. Lebedev², Doctor of Sciences, Full Professor.

Optimization of the queuing system with many servers and with recurrent flow of jobs of different types

This paper considers a queuing system with many servers which receives jobs that require different service time. The service time is exponentially distributed with parameter depending on the type of the job. The input flow is assumed to be an arbitrary recurrent process of events.

As a result it was described a way to find the stationary probabilities of the service process. At last it was provided an example of input flows optimization in order to make servers to be loaded effectively.

Key Words: queuing system, recurrent flow, stationary probabilities.

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova av., 4d, e-mail: igor@ert.org.ua

²Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova av., 4d, e-mail: leb@unicyb.kiev.ua

де $X_i(t)$ – кількість виконавців, зайнятих заявками i -го типу в момент часу $t \geq 0$.

Позначимо τ_n — час надходження n -ї заявки. Тоді $(\tau_{n+1} - \tau_n)$ має функцію розподілу $F(x)$.

Позначимо $\zeta_n = X(\tau_n - 0)$. Тобто $\zeta_n = (\zeta_n^1, \zeta_n^2)$ — це стан системи безпосередньо перед надходженням n -ї заявки.

Розглянемо

$$A_{r_1, r_2}^n(s) = E \left\{ e^{-s\tau_n} \binom{\zeta_n^1}{r_1} \binom{\zeta_n^2}{r_2} \right\}.$$

Для подальшого аналізу нам потрібні декілька допоміжних тверджень.

Лема 1 ([1]). Якщо $\xi(M, p)$ – випадкова величина розподілена біноміально з параметрами M та $p \in (0, 1)$, матимемо

$$E \left\{ \binom{M - \xi(M, p)}{r} \right\} = E \left\{ \binom{\xi(M, 1-p)}{r} \right\} = (1-p)^r \binom{M}{r}.$$

Лема 2. Нехай p_{k_1, k_2} – деякий розподіл ймовірностей:

$$p_{k_1, k_2} \geq 0, k_1, k_2 = \overline{0, M}, k_1 + k_2 \leq M, \sum_{k_1=0}^M \sum_{k_2=0}^{M-k_1} p_{k_1, k_2} = 1.$$

Якщо

$$b_{r_1, r_2} = \sum_{k_1=r_1}^{M-r_2} \sum_{k_2=r_2}^{M-k_1} \binom{k_1}{r_1} \binom{k_2}{r_2} p_{k_1, k_2}$$

(r_1, r_2) -й біноміальний момент цього розподілу, тоді

$$p_{k_1, k_2} = \sum_{r_1=k_1}^{M-k_2} \sum_{r_2=k_2}^{M-r_1} (-1)^{r_1-k_1+r_2-k_2} \binom{r_1}{k_1} \binom{r_2}{k_2} b_{r_1, r_2}.$$

Доведення. Спочатку покажемо, що для довільних d_k та $0 \leq r \leq m$ з

$$c_r = \sum_{k=r}^m \binom{k}{r} d_k \quad (1)$$

випливає

$$d_k = \sum_{r=k}^m (-1)^{r-k} \binom{r}{k} c_r. \quad (2)$$

Підставивши вираз для c_r в формулу для d_k , отримаємо

$$d_k = \sum_{r=k}^m (-1)^{r-k} \binom{r}{k} \sum_{i=r}^m \binom{i}{r} d_i = \sum_{i=k}^m d_i \sum_{r=k}^i (-1)^{r-k} \binom{r}{k} \binom{i}{r}.$$

Для доведення (1)-(2) достатньо показати, що

$$\sum_{r=k}^i (-1)^{r-k} \binom{r}{k} \binom{i}{r} = \begin{cases} 1, & i = k, \\ 0, & i > k. \end{cases}$$

Випадок $i = k$ є очевидним. Розглянемо випадок $i > k$.

$$\begin{aligned} \sum_{r=k}^i (-1)^{r-k} \binom{i}{r} \binom{r}{k} &= \sum_{r=k}^i (-1)^{r-k} \binom{i}{k} \binom{i-k}{r-k} = \\ &= \binom{i}{k} \sum_{r=0}^{i-k} (-1)^r \binom{i-k}{r} = \binom{i}{k} (1-1)^{i-k} = 0. \end{aligned}$$

Отже маємо (1)-(2) доведеним. Тепер до

$$b_{r_1, r_2} = \sum_{k_1=r_1}^{M-r_2} \binom{k_1}{r_1} \sum_{k_2=r_2}^{M-k_1} \binom{k_2}{r_2} p_{k_1, k_2} \quad (3)$$

застосуємо двічі перетворення (1)-(2), з чого й отримаємо твердження леми. ■

Лема 3 ([3, с. 212]). Якщо для деякої послідовності x_n існує $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x$, тоді

$$\lim_{w \rightarrow 1} (1-w) \sum_{i=0}^{\infty} x_i w^i = x.$$

Теорема 1. $A_{r_1, r_2}^n(s)$ задовольняють наступним співвідношенням

$$\begin{aligned} A_{0,0}^n(s) &= \left(\int_0^{\infty} e^{-sx} dF(x) \right)^n = \phi(s)^n \\ A_{r_1, r_2}^{n+1}(s) &= \phi(s + \mu_1 r_1 + \mu_2 r_2) \left(A_{r_1, r_2}^n(s) + \right. \\ &\quad + p_1 A_{r_1-1, r_2}^n(s) + p_2 A_{r_1, r_2-1}^n(s) - \\ &\quad - \sum_{a_i: a_1+a_2=M} \left(p_1 \binom{a_1}{r_1-1} \binom{a_2}{r_2} + \right. \\ &\quad \left. + p_2 \binom{a_1}{r_1} \binom{a_2}{r_2-1} \right) A_{a_1, a_2}^n(s) \Big). \end{aligned}$$

Доведення. Розглянемо

$$\begin{aligned} E \left\{ e^{-s\tau_{n+1}} \binom{\zeta_{n+1}^1}{r_1} \binom{\zeta_{n+1}^2}{r_2} \middle| \zeta_n = (a_1, a_2), \tau_{n+1} - \tau_n = x \right\} = \\ = e^{-sx} E \left\{ e^{-s\tau_n} \middle| \zeta_n = (a_1, a_2) \right\} \cdot \end{aligned}$$

$$\sum_{k=1}^2 p_k E \left\{ \binom{\zeta_{n+1}^k}{r_k} \binom{a_{3-k} - \xi(a_{3-k}, 1 - e^{-\mu_{3-k}x})}{r_{3-k}} \middle| \zeta_n = (a_1, a_2), \tau_{n+1} - \tau_n = x, n\text{-а заявка має тип } k \right\},$$

де $\xi(k, p)$ – випадкова величина розподілена біноміально з параметрами k та $p \in (0, 1)$.

Перетворимо останній вираз, використовуючи лему 1. Отримаємо

$$\begin{aligned} E \left\{ e^{-s\tau_{n+1}} \binom{\zeta_{n+1}^1}{r_1} \binom{\zeta_{n+1}^2}{r_2} \middle| \zeta_n = (a_1, a_2), \tau_{n+1} - \tau_n = x \right\} = \\ = e^{-(s+\mu_1 r_1 + \mu_2 r_2)x} E \left\{ e^{-s\tau_n} \middle| \zeta_n = (a_1, a_2) \right\} \cdot \\ \cdot \sum_{k=1}^2 p_k \binom{a_{3-k}}{r_{3-k}} d(a_k, r_k), \end{aligned}$$

де

$$d(a_k, r_k) = \begin{cases} \binom{a_k+1}{r_k}, & a_1 + a_2 < M, \\ \binom{a_k}{r_k}, & a_1 + a_2 = M. \end{cases}$$

Якщо час очікування заявки має функцію розподілу $F(x)$ та $\phi(s) = \int_0^{\infty} e^{-sx} dF(x)$, тоді

$$\begin{aligned} E \left\{ e^{-s\tau_{n+1}} \binom{\zeta_{n+1}^1}{r_1} \binom{\zeta_{n+1}^2}{r_2} \middle| \zeta_n = (a_1, a_2) \right\} = \\ = \phi(s + \mu_1 r_1 + \mu_2 r_2) E \left\{ e^{-s\tau_n} \middle| \zeta_n = (a_1, a_2) \right\} \cdot \\ \cdot \sum_{k=1}^2 p_k \binom{a_{3-k}}{r_{3-k}} d(a_k, r_k). \end{aligned}$$

Помножимо рівність на $P\{\zeta_n = (a_1, a_2)\}$ та просумуємо по $a_1, a_2 \geq 0: a_1 + a_2 \leq M$. Матимемо

$$\begin{aligned} A_{r_1, r_2}^{n+1}(s) &= \phi(s + \mu_1 r_1 + \mu_2 r_2) \cdot \\ &\cdot \sum_{k=1}^2 p_k \left(\sum_{a_i: a_1+a_2+1 \leq M} \binom{a_{3-k}}{r_{3-k}} \left(\binom{a_k}{r_k} + \binom{a_k}{r_k-1} \right) \right) \cdot \\ &\cdot E \left\{ e^{-s\tau_n} \middle| \zeta_n = (a_1, a_2) \right\} P\{\zeta_n = (a_1, a_2)\} + \\ &+ \sum_{a_i: a_1+a_2+1 > M} \binom{a_1}{r_1} \binom{a_2}{r_2} E \left\{ e^{-s\tau_n} \middle| \zeta_n = (a_1, a_2) \right\} \cdot \\ &\cdot P\{\zeta_n = (a_1, a_2)\} \Big). \end{aligned}$$

Враховуючи, що

$$A_{r_1, r_2}^n(s) = \sum_{a_i: a_1 + a_2 \leq M} \binom{a_1}{r_1} \binom{a_2}{r_2} \cdot E\{e^{-s\tau_n} | \zeta_n = (a_1, a_2)\} P\{\zeta_n = (a_1, a_2)\}$$

та використавши лему 2, отримаємо твердження теореми. ■

Наслідок 1. Генератрису для $A_{r_1, r_2}^n(s)$

$$\Phi_{r_1, r_2}(s, w) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{r_1, r_2}^n(s) w^n \quad (4)$$

можна визначити наступними співвідношеннями

$$\begin{aligned} \Phi_{0,0}(s, w) &= \frac{w\phi(s)}{1 - w\phi(s)} \\ \Phi_{r_1, r_2}(s, w) &= \frac{w\phi(s + \mu_1 r_1 + \mu_2 r_2)}{1 - w\phi(s + \mu_1 r_1 + \mu_2 r_2)} \cdot \left(\binom{i_0^1}{r_1} \binom{i_0^2}{r_2} + \right. \\ &\quad + p_1 \Phi_{r_1-1, r_2}(s) + p_2 \Phi_{r_1, r_2-1}(s) - \\ &\quad - \sum_{a_i: a_1 + a_2 = M} \left(p_1 \binom{a_1}{r_1-1} \binom{a_2}{r_2} + p_2 \binom{a_1}{r_1} \binom{a_2}{r_2-1} \right) \cdot \\ &\quad \cdot \Phi_{a_1, a_2}(s) \Big), \end{aligned}$$

де i_0^1 та i_0^2 – кількість зайнятих виконавців в момент часу $t = 0$ заявками першого та другого типів відповідно.

Доведення.

$$\Phi_{0,0}(s, w) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{0,0}^n(s) w^n = \sum_{n=1}^{\infty} \phi(s)^n w^n = \frac{w\phi(s)}{1 - w\phi(s)}$$

Рекурентне співвідношення для $\Phi_{r_1, r_2}(s, w)$ отримується перетворенням відповідного рекурентного співвідношення для $A_{r_1, r_2}^n(s)$, отриманого в теоремі 1. ■

Теорема 2. Біноміальні моменти

$$B_{r_1, r_2} = \sum_{a_i: a_1 + a_2 \leq M} \binom{a_1}{r_1} \binom{a_2}{r_2} P_{a_1, a_2}$$

стаціонарного розподілу

$$P_{a_1, a_2} = \lim_{n \rightarrow \infty} P\{\zeta_n = (a_1, a_2)\}$$

процесу $\zeta_n = (\zeta_n^1, \zeta_n^2)$ задовольняють наступним співвідношенням:

$$B_{0,0} = 1$$

$$\begin{aligned} B_{r_1, r_2} &= \frac{\phi(\mu_1 r_1 + \mu_2 r_2)}{1 - \phi(\mu_1 r_1 + \mu_2 r_2)} \cdot \\ &\quad \cdot (p_1 B_{r_1-1, r_2} + p_2 B_{r_1, r_2-1} - \\ &\quad - \sum_{a_i: a_1 + a_2 = M} \left(p_1 \binom{a_1}{r_1-1} \binom{a_2}{r_2} + p_2 \binom{a_1}{r_1} \binom{a_2}{r_2-1} \right) \cdot \\ &\quad \cdot B_{a_1, a_2}). \end{aligned}$$

Доведення. Використовуючи лему 3, маємо

$$\begin{aligned} B_{r_1, r_2} &= \lim_{n \rightarrow \infty} B_{r_1, r_2}^n = \lim_{w \rightarrow 1} (1 - w) \sum_{i=1}^{\infty} B_{r_1, r_2}^i w^i = \\ &= \lim_{w \rightarrow 1} (1 - w) \Phi_{r_1, r_2}(0, w). \end{aligned}$$

Використовуючи рекурентне співвідношення для $\Phi_{r_1, r_2}(0, w)$ з наслідку 1, маємо

$$\begin{aligned} \lim_{w \rightarrow 1} (1 - w) \Phi_{r_1, r_2}(0, w) &= \\ &= \frac{\phi(\mu_1 r_1 + \mu_2 r_2)}{1 - \phi(\mu_1 r_1 + \mu_2 r_2)} \cdot \left(p_1 \lim_{w \rightarrow 1} (1 - w) \Phi_{r_1-1, r_2}(0, w) \right. \\ &\quad + p_2 \lim_{w \rightarrow 1} (1 - w) \Phi_{r_1, r_2-1}(0, w) - \\ &\quad - \sum_{a_i: a_1 + a_2 = M} \left(p_1 \binom{a_1}{r_1-1} \binom{a_2}{r_2} + p_2 \binom{a_1}{r_1} \binom{a_2}{r_2-1} \right) \cdot \\ &\quad \cdot \lim_{w \rightarrow 1} (1 - w) \Phi_{a_1, a_2}(0, w) \Big), \end{aligned}$$

звідки отримуємо рекурентне співвідношення для B_{r_1, r_2} . Розглянемо випадок $B_{0,0}$ окремо.

$$\begin{aligned} \lim_{w \rightarrow 1} (1 - w) \Phi_{0,0}(0, w) &= \lim_{w \rightarrow 1} \frac{(1 - w) w \phi(0)}{1 - w \phi(0)} = \\ &= \lim_{w \rightarrow 1} \frac{(1 - w) w \int_0^{\infty} e^{-0x} dF(x)}{1 - w \int_0^{\infty} e^{-0x} dF(x)} = \lim_{w \rightarrow 1} \frac{(1 - w) w}{1 - w} = 1. \end{aligned}$$

Що і треба було довести. Теорему доведено. ■

Лема 4. Якщо $f(0, 0) = 0$, то розв'язок рекурентного співвідношення

$$b_{r_1, r_2} = c(r_1, r_2) (c_1 b_{r_1-1, r_2} + c_2 b_{r_1, r_2-1}) + f(r_1, r_2)$$

можна подати у вигляді

$$\begin{aligned} b_{r_1, r_2} &= d_{0,0,r_1,r_2} c_1^{r_1} c_2^{r_2} b_{0,0} + \\ &+ \sum_{a_1=0}^{r_1} \sum_{a_2=0}^{r_2} d_{a_1, a_2, r_1, r_2} f(a_1, a_2) c_1^{r_1-a_1} c_2^{r_2-a_2}, \quad (5) \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} d_{a_1, a_2, a_1, a_2} &= 1 \\ d_{a_1, a_2, a_1, r_2} &= c(a_1, r_2) d_{a_1, a_2, a_1, r_2-1} \\ d_{a_1, a_2, r_1, a_2} &= c(r_1, a_2) d_{a_1, a_2, r_1-1, a_2} \\ d_{a_1, a_2, r_1, r_2} &= c(r_1, r_2) (d_{a_1, a_2, r_1-1, r_2} + d_{a_1, a_2, r_1, r_2-1}) \end{aligned}$$

тобто

$$d_{a_1, a_2, r_1, r_2} = \sum_{\substack{\text{по всім шляхам } \pi \\ \text{з } (a_1, a_2) \text{ в } (r_1, r_2)}} \prod_{\substack{\text{по всім клітинках } (b_1, b_2) \\ \text{шляху } \pi \text{ крім } (a_1, a_2)}} c(b_1, b_2)$$

Доведення леми можна отримати підстановкою (5) у рекурентне співвідношення для b_{r_1, r_2} .

Наслідок 2. Біноміальний момент

$$B_{r_1, r_2} = \sum_{a_i: a_1 + a_2 \leq M} \binom{a_1}{r_1} \binom{a_2}{r_2} P_{a_1, a_2}$$

стаціонарного розподілу

$$P_{a_1, a_2} = \lim_{n \rightarrow \infty} P\{\zeta_n = (a_1, a_2)\}$$

процесу $\zeta_n = (\zeta_n^1, \zeta_n^2)$ можна подати у вигляді:

$$B_{r_1, r_2} = d_{0,0,r_1,r_2} p_1^{r_1} p_2^{r_2} - \sum_{b_1=0}^{r_1} \sum_{b_2=0}^{r_2} d_{b_1,b_2,r_1,r_2} p_1^{r_1-b_1} p_2^{r_2-b_2} c(b_1, b_2) \cdot$$

$$\cdot \sum_{a_1=0}^M B_{a_1, M-a_1} \left(p_1 \binom{a_1}{b_1-1} \binom{M-a_1}{b_2} + p_2 \binom{a_1}{b_1} \binom{M-a_1}{b_2-1} \right)$$

де d_{b_1,b_2,r_1,r_2} визначені як в лемі 4 при

$$c(r_1, r_2) = \frac{\phi(\mu_1 r_1 + \mu_2 r_2)}{1 - \phi(\mu_1 r_1 + \mu_2 r_2)}$$

та $B_{r_1, M-r_1}$ визначені системою (якщо її розв'язок існує)

$$B_{r_1, M-r_1} + \sum_{a_1=0}^M B_{a_1, M-a_1} \sum_{b_1=0}^{r_1} \sum_{b_2=0}^{M-r_1} d_{b_1,b_2,r_1,M-r_1} \cdot p_1^{r_1-b_1} p_2^{M-r_1-b_2} c(b_1, b_2) \cdot \left(p_1 \binom{a_1}{b_1-1} \binom{M-a_1}{b_2} + p_2 \binom{a_1}{b_1} \binom{M-a_1}{b_2-1} \right) = d_{0,0,r_1,M-r_1} p_1^{r_1} p_2^{M-r_1}.$$

Доведення. Застосовуємо лему 4 до результату теорему 2. ■

Лема 5. Якщо P_{r_1, r_2} стаціонарні ймовірності для процесу ζ_n . Тоді стаціонарні ймовірності $\bar{P}_{r_1, r_2}$ процесу $X(\tau_n)$, $n = 0, 1, \dots$ дорівнюють

$$\bar{P}_{r_1, r_2} = \begin{cases} P_{r_1-1, r_2} p_1 + P_{r_1, r_2-1} p_2, & r_1 + r_2 < M, \\ P_{r_1-1, r_2} p_1 + P_{r_1, r_2-1} p_2 + P_{r_1, r_2}, & r_1 + r_2 = M. \end{cases} \quad (6)$$

Розглянемо задачу оптимізації параметрів p_1 та p_2 вхідного потоку

$$\begin{cases} c_1 E\{X^1\} + c_2 E\{X^2\} \rightarrow \max, \\ p_1 + p_2 = 1, \end{cases}$$

де розподіл вектора (X^1, X^2) співпадає з (6).

Виразивши $p_2 = 1 - p_1$, матимемо

$$E\{X^i\} = \sum_{a: a_1 + a_2 \leq M} \bar{P}_{a_1, a_2}(p_1) a_i$$

$$c_1 E\{X^1\} + c_2 E\{X^2\} = \sum_{a: a_1 + a_2 \leq M} \bar{P}_{a_1, a_2}(p_1) (c_1 a_1 + c_2 a_2).$$

Дану функцію можна максимізувати чисельно. Розглянемо, для прикладу, випадок $\mu_1 = .5$, $\mu_2 = .6$, $c_1 = 54$, $c_2 = 60$, якщо час між надходженнями заявок розподілений згідно гамма розподілу з параметрами 2 та 1/3.

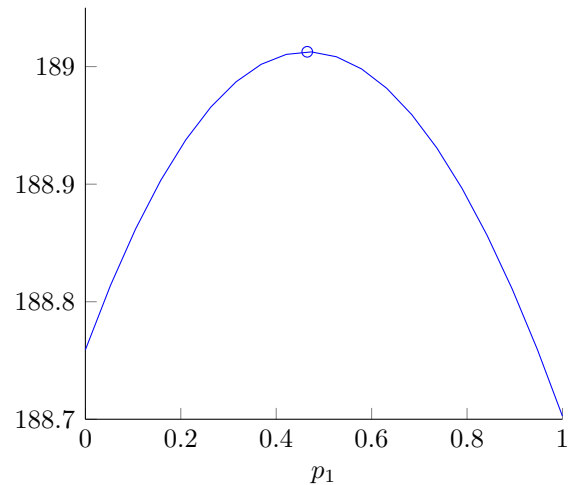


Рис. 1. Функція $c_1 E\{X^1\} + c_2 E\{X^2\}$ в залежності від p_1 .

Таким чином оптимальними значеннями керуючих ймовірностей для обраних параметрів будуть $p_1 = 0.4651$ та $p_2 = 0.5349$.

Список використаних джерел

- [1] Takács Lajos. Introduction to the Theory of Queues. — Oxford University Press, 1962. — P. 268.
- [2] Lebedev Eugene, Ponomarchuk Oleg. On queuing systems with failures and several types of input flows // Top. — 1999. — Vol. 7, no. 2. — P. 323–332.
- [3] Klimov G. P. Stochastic service system. — Nauka, 1966. — P. 243. — (in Russian).

Надійшла до редколегії 22.09.13

УДК 519.21

Макушенко І.А., к. ф.-м. н.

Двокритеріальна задача керування напрямком вхідного потоку для багатоканальних мереж немарковського типу

Для багатоканальної мережі немарковського типу розглянуто задачу максимізації середнього прибутку та мінімізації величини ризику. В явному вигляді, через параметри моделі знайдені цільові функції оптимізаційної задачі.

Ключові слова: багатоканальна мережа, оптимальне керування, генератриса, інтегральне рівняння.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: iamak@ukr.net

I.A. Makushenko, Ph.D.

Two-criterion problem of controlling the direction of the input flow for multichannel networks of non Markov type

The problem of maximization of average income and risk minimization for the multichannel network of non Markov type is considered. The goal functions of optimization problem are found via system parameters in explicit form.

Key Words: multichannel network, optimal control, generating function, integral equation.

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: iamak@ukr.net

Статтю представив д. т. н., проф. Заславський В.А.

1. Вступ

На сьогоднішній день теорія стохастичних мереж є одним з основних перспективних напрямків моделювання систем мережевої структури. Важливим класом задач у дослідженні стохастичних мереж є оптимізаційні задачі пов'язані з розподілом інформаційних потоків. Розв'язки таких задач надають можливість вирішувати практичні задачі керування ресурсами інформаційно-обчислювальних мереж та мереж зв'язку. Сучасний стан досліджень в цій області представлено в роботах [1], [2].

Тема даної роботи пов'язана з проблемою оптимального поділу між вузлами мережі зовнішнього навантаження. У роботі для немарковських стохастичних мереж типу $[G | G | \infty]^r$ розглянуто задачу оптимального керування напрямком вхідного потоку. При цьому вибір стратегії керування базується на таких показниках якості функціонування мережі як середній прибуток від роботи всієї мережі та ризик досягнення певного прибутку.

Розглянемо мережу масового обслуговування, яка складається з r однотипних обслуговуючих вузлів. На обслуговуючі вузли іззовні надходить один загальний рекурентний потік вимог $\nu(t)$. Проміжок часу між моментами надходження вимог розподілений у відповідності з функцією розподілу $F(t)$. Вимога, що надійшла на вхід

мережі, з імовірністю q_i , $i = 1, 2, \dots, r$, ($\sum_{i=1}^r q_i = 1$)

спрямовується для обслуговування в i -ий вузол. Час обслуговування вимоги в i -ому вузлі має функцію розподілу $G_i(t)$, $i = 1, 2, \dots, r$. Через

$P = \| p_{ij} \|_1^r$ будемо позначати матрицю маршрутизації мережі. Зручно ввести " $r+1$ " вузол і інтерпретувати його як вихід з мережі обслуговування, $p_{i,r+1} = 1 - \sum_{j=1}^r p_{ij}$ - імовірність

виходу з мережі після обслуговування в i -ому вузлі. Мережі такого типу використовуються при моделюванні інформаційно-обчислювальних мереж та мереж зв'язку ([3], [4]).

2. Постановка оптимізаційної задачі

На процесі обслуговування вимог у $[G | G | \infty]^r$ -мережі визначимо адитивний функціонал $S(t) = (S_1(t), S_2(t), \dots, S_r(t))$, де $S_i(t)$, $i = 1, 2, \dots, r$ - число вимог, обслуговування яких завершилося в i -ому вузлі за час t . Якщо існують границі $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} M S_i(t)$, то будемо позначати їх через m_i , $i = 1, 2, \dots, r$. Очевидно, що m_i , $i = 1, 2, \dots, r$ залежать від параметрів

$[G I | G I | \infty]^r$ - мережі: $q' = (q_1, q_2, \dots, q_r)$, $F(t)$, $G_i(t)$, $i = 1, 2, \dots, r$, $P = \|p_{ij}\|_1^r$. У подальшому будемо вважати, що $F(t)$, $G_i(t)$, $i = 1, 2, \dots, r$, P є заданими, а вибір вектора q знаходиться у нашому розпорядженні. Таким чином $m_i = m_i(q)$, $i = 1, 2, \dots, r$. Аналогічно, якщо існують границі $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \text{cov}(S_i(t), S_j(t))$, то будемо позначати їх через $V_{ij} = V_{ij}(q)$, $i, j = 1, 2, \dots, r$.

Нехай C_i , $i = 1, 2, \dots, r$ - прибуток від обслуговування однієї вимоги в i -ому вузлі. Тоді важливе значення має наступна двокритеріальна оптимізаційна задача:

$$M(q) = \sum_{i=1}^r C_i m_i(q) \rightarrow \max, \quad (1)$$

$$V(q) = \sum_{i,j=1}^r C_i V_{ij}(q) C_j \rightarrow \min, \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^r q_i = 1, \quad q_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, r. \quad (3)$$

Розв'язок $q^* = (q_1^*, q_2^*, \dots, q_r^*)$ оптимізаційної задачі (1) – (3) представляє собою таке керування вхідним потоком, яке одночасно максимізує середній прибуток від роботи мережі та мінімізує ризик досягнення цього прибутку.

3. Знаходження явного виду цільових функцій

Для того, щоб розв'язати оптимізаційну задачу (1) – (3), необхідно подати функціонали $M(q)$ і $D(q)$ через параметри мережі.

Перед тим, як шукати розв'язок оптимізаційних задач, вивчимо адитивний функціонал $S(t) = (S_1(t), S_2(t), \dots, S_r(t))$, $t \geq 0$.

Нехай $\Phi(t, z)$, $z' = (z_1, \dots, z_r)$, $|z| \leq 1$ - генератриса вектора $S(t)$. Для $\Phi(t, z)$ справедливий такий результат.

Лема 1. Функція $\Phi(t, z)$ є єдиним розв'язком системи інтегральних рівнянь

$$\begin{aligned} \Phi(t, z) &= 1 - F(t) + \\ &+ \int_0^t \Phi(t-u, z) \left[\sum_{i=1}^r q_i \Phi^{(i)}(t-u, z) \right] dF(u), \quad (4) \\ \Phi^{(i)}(t, z) &= [1 - G_i(t)] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \int_0^t \left[z_i \sum_{j=1}^r p_{ij} \Phi^{(j)}(t-u, z) + p_{i,r+1} \right] dG_i(u), \quad (5) \\ &i = 1, 2, \dots, r. \end{aligned}$$

Доведення леми базується на моделюванні процесу обслуговування вимог у $[G I | G I | \infty]^r$ - мережі разом з введенням вище адитивним функціоналом гіллястим процесом Беллмана-Харріса ([5]) з $2r+1$ типами частинок.

За допомогою генератрис $\Phi(t, z)$ можна визначити моменти першого і другого порядку адитивного функціоналу $S(t) = (S_1(t), S_2(t), \dots, S_r(t))$.

Нехай

$$\begin{aligned} A_\alpha(t) &= \frac{\partial \Phi(t, z)}{\partial z_\alpha} \Big|_{z=\bar{1}}, \quad B_{\alpha\beta}(t) = \frac{\partial^2 \Phi(t, z)}{\partial z_\alpha \partial z_\beta} \Big|_{z=\bar{1}}, \\ &\alpha, \beta = 1, 2, \dots, r. \end{aligned}$$

Тоді, очевидно,

$$\begin{aligned} M S_\alpha(t) &= A_\alpha(t), \\ \text{cov}(S_\alpha(t), S_\beta(t)) &= B_{\alpha\beta}(t) + \delta_{\alpha\beta} A_\alpha(t) - A_\alpha(t) A_\beta(t), \\ &\alpha, \beta = 1, 2, \dots, r. \end{aligned}$$

В свою чергу з (4), (5) випливає, що у визначенні $A_\alpha(t)$, $B_{\alpha\beta}(t)$, $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, r$ приймають участь функції

$$\begin{aligned} A_\alpha^{(i)}(t) &= \frac{\partial \Phi^{(i)}(t, z)}{\partial z_\alpha} \Big|_{z=\bar{1}}, \quad B_{\alpha\beta}^{(i)}(t) = \frac{\partial^2 \Phi^{(i)}(t, z)}{\partial z_\alpha \partial z_\beta} \Big|_{z=\bar{1}}, \\ &i, \alpha, \beta = 1, 2, \dots, r. \end{aligned}$$

З леми 1 випливає наступний результат.

Наслідок 1. Функції $A_\alpha(t)$, $A_\alpha^{(i)}(t)$, $B_{\alpha\beta}(t)$,

$B_{\alpha\beta}^{(i)}(t)$ є єдиним розв'язком систем інтегральних рівнянь:

1)

$$\begin{aligned} A_\alpha^{(i)}(t) &= \int_0^t A_\alpha(t-u) dF(u) + \\ &+ \sum_{i=1}^r q_i \int_0^t A_\alpha^{(i)}(t-u) dF(u), \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_\alpha^{(i)}(t) &= \delta_{i\alpha} (1 - p_{i,r+1}) G_i(t) + \\ &+ \sum_{j=1}^r \int_0^t dG_i(u) p_{ij} A_\alpha^{(j)}(t-u), \quad (7) \\ &i, \alpha = 1, 2, \dots, r; \end{aligned}$$

2)

$$\begin{aligned} B_{\alpha\beta}(t) &= \int_0^t B_{\alpha\beta}(t-u) dF(u) + \\ &+ \int_0^t A_{\alpha}(t-u) \left[\sum_{i=1}^r q_i A_{\beta}^{(i)}(t-u) \right] dF(u) + \\ &+ \int_0^t A_{\beta}(t-u) \left[\sum_{i=1}^r q_i A_{\alpha}^{(i)}(t-u) \right] dF(u) + \\ &+ \int_0^t \left[\sum_{i=1}^r q_i B_{\alpha\beta}^{(i)}(t-u) \right] dF(u), \\ B_{\alpha\beta}^{(i)}(t) &= \sum_{j=1}^r \int_0^t dG_i(u) p_{ij} B_{\alpha\beta}^{(j)}(t-u) + \\ &+ \delta_{i\alpha} \sum_{j=1}^r \int_0^t dG_i(u) p_{ij} A_{\beta}^{(j)}(t-u) + \\ &+ \delta_{i\beta} \sum_{j=1}^r \int_0^t dG_i(u) p_{ij} A_{\alpha}^{(j)}(t-u), \\ i, \alpha, \beta &= 1, 2, \dots, r. \end{aligned} \quad (8)$$

Інтегральні рівняння 1), 2) є взаємозв'язаними. Розглянемо 1). Перше рівняння системи (6) є рівнянням відновлення, куди підставляється розв'язок системи рівнянь марковського відновлення (7). Система 2) має таку ж структуру, але є складнішою. До правих частин (8), (9) входять розв'язки системи 1). Отримані результати дозволяють звести проблему пошуку функціоналів $M(q)$ і $D(q)$ до асимптотичного аналізу розв'язів систем 1), 2).

Спочатку розглянемо систему рівнянь марковського відновлення (7) і введемо перетворення Лапласа для функцій $A_{\alpha}^{(i)}(t)$, $G_i(t)$, $i, \alpha = 1, 2, \dots, r$

$$A_{\alpha}^{(i)}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} A_{\alpha}^{(i)}(t) dt,$$

$$g_i(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} dG_i(t), \quad \operatorname{Re} s \geq 0, \quad A(s) = \| A_{\alpha}^{(i)}(s) \|_1^r.$$

Справедливий такий результат.

Лема 2. Якщо спектральний радіус матриці маршрутизації P менший 1, то

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \| A_{\alpha}^{(i)}(t) \|_1^r = A = \| A_{\alpha}^{(i)} \|_1^r = (I - P)^{-1} \Delta (1 - p_{r+1}),$$

де $1 - p_{r+1} = (1 - p_{1r+1}, \dots, 1 - p_{rr+1})$.

Доведення:

В термінах перетворень Лапласа систему (7) можна записати так

$$A_{\alpha}^{(i)}(s) = \frac{1}{s} g_i(s) \delta_{i\alpha} (1 - p_{ir+1}) + \sum_{j=1}^r g_i(s) p_{ij} A_{\alpha}^{(j)}(s),$$

$i, \alpha = 1, 2, \dots, r,$

або, використовуючи матричні позначення для $A(s)$, маємо рівняння

$$A(s) = \frac{1}{s} \Delta [(1 - p_{r+1}) g(s)] + \Delta(g(s)) P A(s), \quad (10)$$

$$\text{де } \Delta[(1 - p_{r+1}) g(s)] = \| \delta_{ij} (1 - p_{ir+1}) g_i(s) \|_1^r,$$

$$\Delta(g(s)) = \| \delta_{ij} g_i(s) \|_1^r.$$

Розв'язком (10) буде

$$A(s) = \frac{1}{s} [I - \Delta(g(s)) P]^{-1} \Delta[(1 - p_{r+1}) g(s)]. \quad (11)$$

Функція $A_{\alpha}^{(i)}(t)$ представляє собою математичне сподівання числа відвідувань вузла “ α ” за час t вимогою, яка у початковий момент часу знаходилась в i -ому вузлі. Тому $A_{\alpha}^{(i)}(t)$ монотонно неспадна функція. З урахуванням (11) і тауберової теореми для перетворень Лапласа ([6], стор. 211-212), знаходимо

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \| A_{\alpha}^{(i)}(t) \|_1^r = \lim_{s \rightarrow 0+} s A(s) = (I - P)^{-1} \Delta(1 - p_{r+1}).$$

Лема доведена.

В лемі 2 встановлено, що функції $A_{\alpha}^{(i)}(t)$, монотонно зростаючи, прямують до скінченних границь $A_{\alpha}^{(i)} < +\infty$, $i, \alpha = 1, 2, \dots, r$. Наша найближча мета - проаналізувати порядок збіжності $A_{\alpha}^{(i)}(t)$ до $A_{\alpha}^{(i)}$.

Лема 3. Якщо спектральний радіус матриці P менший 1 і

$$\int_0^{\infty} t dG_i(t) = \frac{1}{\mu_i} < +\infty, \quad i = 1, 2, \dots, r,$$

то

$$\begin{aligned} &\left\| \int_0^{\infty} [A_{\alpha}^{(i)} - A_{\alpha}^{(i)}(t)] dt \right\|_1^r = \\ &= (I - P)^{-1} \Delta^{-1}(\mu)(I - P)^{-1} \Delta((1 - p_{r+1})) < +\infty. \end{aligned} \quad (12)$$

Доведення:

Очевидно, що

$$\left\| \int_0^{\infty} [A_{\alpha}^{(i)} - A_{\alpha}^{(i)}(t)] dt \right\|_1^r =$$

$$= \lim_{s \rightarrow 0+} \left\| \int_0^{\infty} [A_{\alpha}^{(i)} - A_{\alpha}^{(i)}(t)] e^{-st} dt \right\|_1^r =$$

$$= \lim_{s \rightarrow 0+} \frac{A - s A(s)}{s}.$$

У правій частині виразу

$$\frac{1}{s} [A - s A(s)] = \frac{1}{s} (I - P)^{-1} \Delta[(1 - p_{r+1})(1 - g(s))] +$$

$$+ \frac{1}{s} [(I - P)^{-1} - (I - \Delta(g(s))P)^{-1}] \Delta[(1 - p_{r+1})g(s)]$$

розглянемо послідовно перший і другий доданки.

З умов леми випливає

$$\lim_{s \rightarrow 0+} \frac{1}{s} (I - P)^{-1} \Delta[(1 - p_{r+1})(1 - g(s))] = \quad (13)$$

$$= (I - P)^{-1} \Delta^{-1}(\mu) \Delta((1 - p_{r+1})).$$

Для другого доданку знаходимо

$$\lim_{s \rightarrow 0+} \frac{1}{s} [(I - P)^{-1} - (I - \Delta(g(s))P)^{-1}] \Delta[(1 - p_{r+1})g(s)] =$$

$$= \lim_{s \rightarrow 0+} \frac{1}{s} \left[\sum_{n=1}^{\infty} (P^n - [\Delta(g(s))P]^n) \right] \Delta((1 - p_{r+1})) =$$

$$= \lim_{s \rightarrow 0+} \frac{1}{s} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{n-1} P^{n-1-k} (I - \Delta(g(s))) \times \right.$$

$$\left. \times P (\Delta(g(s))P)^k \right] \Delta((1 - p_{r+1})) =$$

$$= \left[\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{n-1} P^{n-1-k} \Delta^{-1}(\mu) P^{k+1} \right] \Delta((1 - p_{r+1})) =$$

$$= \left[\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=k}^{\infty} P^{n-k} \Delta^{-1}(\mu) P^k \right] \Delta((1 - p_{r+1})) =$$

$$= (I - P)^{-1} \Delta^{-1}(\mu) (I - P)^{-1} \Delta((1 - p_{r+1})) -$$

$$- (I - P)^{-1} \Delta^{-1}(\mu) \Delta((1 - p_{r+1})).$$

Враховуючи (13), ми приходимо до (12).

Лема доведена.

Наслідок 2. Якщо виконуються умови леми 3, то для довільних $i, \alpha = 1, 2, \dots, r$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} t (A_{\alpha}^{(i)} - A_{\alpha}^{(i)}(t)) = 0.$$

За $A_{\alpha}^{(i)}(t)$ і $F(t)$ визначимо функції

$$\tilde{A}_{\alpha}^{(i)}(t) = \int_0^t A_{\alpha}^{(i)}(t-u) dF(u), \quad i, \alpha = 1, 2, \dots, r.$$

З властивостей $A_{\alpha}^{(i)}(t)$ випливають наступні результати.

Лема 4. Функції $\tilde{A}_{\alpha}^{(i)}(t)$ монотонно неспадні і, якщо спектральний радіус матриці P менший 1, то

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{A}_{\alpha}^{(i)}(t) = A_{\alpha}^{(i)} < +\infty, \quad i, \alpha = 1, 2, \dots, r.$$

Лема 5. Якщо виконуються умови леми 3 і

$$\int_0^{\infty} t dF(t) = \frac{1}{\lambda} < +\infty, \quad \text{то}$$

$$\left\| \int_0^{\infty} [A_{\alpha}^{(i)} - \tilde{A}_{\alpha}^{(i)}(t)] dt \right\|_1^r =$$

$$= \frac{1}{\lambda} A + (I - P)^{-1} \Delta^{-1}(\mu) (I - P)^{-1} \Delta((1 - p_{r+1})) < +\infty.$$

Розглянемо тепер для функцій $B_{\alpha\beta}^{(i)}(t)$, $i = 1, 2, \dots, r$, систему рівнянь марковського відновлення (9).

Нехай $I_{\alpha} = \|\delta_{ij} \delta_{i\alpha}\|_{i,j=1}^r$ - діагональна матриця, e_i - r -вимірний вектор, i -та компонента якого дорівнює 1, а інші - нулю, $i = 1, 2, \dots, r$. Асимптотичну поведінку розв'язку $B_{\alpha\beta}'(t) = (B_{\alpha\beta}^{(1)}(t), B_{\alpha\beta}^{(2)}(t), \dots, B_{\alpha\beta}^{(r)}(t))$ системи (9) вивчено у наступній лемі.

Лема 6. Якщо спектральний радіус матриці P менший 1, то

$$\lim_{t \rightarrow \infty} B_{\alpha\beta}(t) = (I - P)^{-1} I_{\alpha} P (I - P)^{-1} e_{\beta} (1 - p_{\beta r+1}) +$$

$$+ (I - P)^{-1} I_{\beta} P (I - P)^{-1} e_{\alpha} (1 - p_{\alpha r+1}), \quad (14)$$

$$\alpha, \beta = 1, \dots, r.$$

Доведення формули (14) базується на тауберовій теоремі для перетворень Лапласа і є аналогічним доведенню леми 2.

Введемо функції $\tilde{B}_{\alpha\beta}^{(i)}(t)$ за допомогою співвідношень

$$\tilde{B}_{\alpha\beta}^{(i)}(t) = \int_0^t B_{\alpha\beta}^{(i)}(t-u) dF(u), \quad i, \alpha, \beta = 1, 2, \dots, r,$$

$$\tilde{B}_{\alpha\beta}'(t) = (\tilde{B}_{\alpha\beta}^{(1)}(t), \tilde{B}_{\alpha\beta}^{(2)}(t), \dots, \tilde{B}_{\alpha\beta}^{(r)}(t)).$$

Для них справедливі наступні результати.

Наслідок 3. Якщо виконуються умови леми 6, то

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{B}_{\alpha\beta}(t) = (I - P)^{-1} I_{\alpha} P (I - P)^{-1} e_{\beta} (1 - p_{\beta r+1}) +$$

$$+ (I - P)^{-1} I_{\beta} P (I - P)^{-1} e_{\alpha} (1 - p_{\alpha r+1}), \quad (15)$$

$$\alpha, \beta = 1, \dots, r.$$

Нехай $H(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} F^{n*}(t)$ - функція відновлення, яка відповідає функції розподілу $F(t)$, і

$$\int_0^t dH(u) \tilde{B}_{\alpha\beta}(t-u) =$$

$$= \left(\int_0^t d H(u) \tilde{B}_{\alpha\beta}^{(1)}(t-u), \dots, \int_0^t d H(u) \tilde{B}_{\alpha\beta}^{(r)}(t-u) \right).$$

Наслідок 4. Якщо $\int_0^\infty t d F(t) = \frac{1}{\lambda} < +\infty$ і спектральний радіус матриці P менший 1, то

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t d H(u) \tilde{B}_{\alpha\beta}(t-u) = \\ = \lambda (I-P)^{-1} I_\alpha P (I-P)^{-1} e_\beta (1-p_{\beta r+1}) + \\ + \lambda (I-P)^{-1} I_\beta P (I-P)^{-1} e_\alpha (1-p_{\alpha r+1}), \\ \alpha, \beta = 1, \dots, r. \end{aligned} \quad (16)$$

Формула (16) є наслідком (15) і теореми 7 ([8], стор. 271).

Підсумуємо попередній аналіз системи інтегральних рівнянь (6) - (9) і доведемо основний результат.

Теорема. Якщо спектральний радіус матриці P менший 1, $\int_0^\infty t^2 d F(t) < +\infty$, $\int_0^\infty t d G_i(t) < +\infty$, $i = 1, 2, \dots, r$, і функція $F(t)$ негратчаста, то:

$$1) \quad M(q) = \lambda q' A C, \quad C' = (C_1, \dots, C_r); \quad (17)$$

$$2) \quad \begin{aligned} D(q) = \sum_{\alpha, \beta=1}^r C_\alpha V_{\alpha\beta}(q) C_\beta, \\ V_{\alpha\beta}(q) = \lambda (\rho^2 - 1) \sum_{i,j=1}^r q_i q_j A_\alpha^{(i)} A_\beta^{(j)} + \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} + \lambda q' (I-P)^{-1} I_\alpha P (I-P)^{-1} e_\beta (1-p_{\beta r+1}) + \\ + \lambda q' (I-P)^{-1} I_\beta P (I-P)^{-1} e_\alpha (1-p_{\alpha r+1}) + \\ + \lambda \delta_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^r q_i A_\alpha^{(i)}, \end{aligned}$$

де $\rho = \lambda \sigma$ - коефіцієнт варіації для випадкового проміжку часу між моментами надходження вимог, σ^2 - дисперсія цього проміжку.

Доведення теореми.

З рівняння (6) знаходимо

$$\begin{aligned} A_\alpha(t) = \sum_{i=1}^r q_i \int_0^t d H(u) \tilde{A}_\alpha^{(i)}(t-u), \\ \alpha = 1, 2, \dots, r. \end{aligned} \quad (19)$$

Таким чином (17) є наслідком лема 4 і того, що

$$\int_0^\infty t d F(t) = \frac{1}{\lambda} < +\infty.$$

Зупинимось на пункті 2).

З (19) і теореми відновлення (теорема 12.8, [7], стор. 205) випливає, що

$$\begin{aligned} A_\alpha(t) = \sum_{i=1}^r q_i \int_0^t d H(u) \tilde{A}_\alpha^{(i)}(t-u) = \\ = H(t) \sum_{i=1}^r q_i A_\alpha^{(i)}(t) - \lambda \sum_{i=1}^r q_i \int_0^\infty [A_\alpha^{(i)} - \tilde{A}_\alpha^{(i)}(u)] d u + o(1). \end{aligned}$$

Таким чином

$$\begin{aligned} \frac{1}{t} A_\alpha(t) A_\beta(t) = \frac{1}{t} H^2(t) \sum_{i,j=1}^r q_i q_j A_\alpha^{(i)} A_\beta^{(j)} - \\ - \lambda \frac{1}{t} H(t) \sum_{i,j=1}^r q_i q_j \left(\int_0^\infty [A_\alpha^{(i)} - \tilde{A}_\alpha^{(i)}(u)] d u \right) A_\beta^{(j)} - \\ - \lambda \frac{1}{t} H(t) \sum_{i,j=1}^r q_i q_j A_\alpha^{(i)} \left(\int_0^\infty [A_\beta^{(j)} - \tilde{A}_\beta^{(j)}(u)] d u \right) + o(1). \end{aligned}$$

З наслідку 2 випливає, що

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} A_\alpha(t) \sum_{j=1}^r q_j (A_\beta^{(j)} - A_\beta^{(j)}(t)) = \\ = \lim_{t \rightarrow \infty} A_\beta(t) \sum_{j=1}^r q_j (A_\alpha^{(j)} - A_\alpha^{(j)}(t)) = 0. \end{aligned}$$

Тому для функцій

$$\varphi_{\alpha\beta}(t) = \int_0^t A_\alpha(t-u) \left[\sum_{j=1}^r q_j A_\beta^{(j)}(t-u) \right] d F(u)$$

справедлива рівність

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t d H(u) [\varphi_{\alpha\beta}(t-u) + \varphi_{\beta\alpha}(t-u)] = \\ = \lim_{t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{t} \left(\int_0^t d H(u) \tilde{A}_\alpha(t-u) \right) \left(\sum_{j=1}^r q_j A_\beta^{(j)} \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{t} \left(\sum_{i=1}^r q_i A_\alpha^{(i)} \right) \left(\int_0^t d H(u) \tilde{A}_\beta(t-u) \right) \right\}, \end{aligned} \quad (20)$$

де

$$\tilde{A}_\alpha(t) = \int_0^t d F(u) A_\alpha(t-u) = A_\alpha(t) - \sum_{i=1}^r q_i \tilde{A}_\alpha^{(i)}(t).$$

Розглянемо праву частину (20)

$$\begin{aligned} \frac{1}{t} \left(\int_0^t d H(u) \tilde{A}_\alpha(t-u) \right) \left(\sum_{j=1}^r q_j A_\beta^{(j)} \right) = \\ = \frac{1}{t} \left[\int_0^t d H(u) H(t-u) - H(t) \right] \sum_{i,j=1}^r q_i q_j A_\alpha^{(i)} A_\beta^{(j)} - \\ - \lambda^2 \sum_{i,j=1}^r q_i q_j \left(\int_0^\infty [A_\alpha^{(i)} - \tilde{A}_\alpha^{(i)}(u)] d u \right) A_\beta^{(j)} + o(1). \end{aligned} \quad (21)$$

Аналогічно

$$\begin{aligned} & \frac{1}{t} \left(\sum_{i=1}^r q_i A_{\alpha}^{(i)} \right) \left(\int_0^t dH(u) \tilde{A}_{\beta}(t-u) \right) = \\ & = \frac{1}{t} \left[\int_0^t dH(u) H(t-u) - H(t) \right] \sum_{i,j=1}^r q_i q_j A_{\alpha}^{(i)} A_{\beta}^{(j)} - \\ & - \lambda^2 \sum_{i,j=1}^r q_i q_j A_{\alpha}^{(i)} \left(\int_0^{\infty} [A_{\beta}^{(j)} - \tilde{A}_{\beta}^{(j)}(u)] du \right) + o(1). \end{aligned} \quad (22)$$

По'єднуючи (20), (21) і (22), знаходимо

$$\begin{aligned} & \frac{1}{t} \int_0^t dH(u) [\varphi_{\alpha\beta}(t-u) + \varphi_{\beta\alpha}(t-u)] = \\ & = \frac{1}{t} \left[2 \int_0^t dH(u) H(t-u) - 2H(t) \right] \sum_{i,j=1}^r q_i q_j A_{\alpha}^{(i)} A_{\beta}^{(j)} - \\ & - \lambda^2 \sum_{i,j=1}^r q_i q_j \left(\int_0^{\infty} [A_{\alpha}^{(i)} - \tilde{A}_{\alpha}^{(i)}(u)] du \right) A_{\beta}^{(j)} - \\ & - \lambda^2 \sum_{i,j=1}^r q_i q_j A_{\alpha}^{(i)} \left(\int_0^{\infty} [A_{\beta}^{(j)} - \tilde{A}_{\beta}^{(j)}(u)] du \right) + o(1). \end{aligned}$$

Враховуючи (16), і те, що

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \left[2 \int_0^t dH(u) H(t-u) - 2H(t) - H^2(t) \right] = \lambda(\rho^2 - 1),$$

приходимо до (18).

Теорема доведена.

4. Висновок

З теореми можна зробити висновок, що цільова функція $M(q)$ оптимізаційної задачі (1) – (3) є лінійною відносно контрольованих параметрів, а $V(q)$ – квадратичною, якщо коефіцієнт варіації для випадкового проміжку часу між моментами надходження вимог $\rho \neq 1$. Таким чином двокритеріальна оптимізаційна задача максимізації середнього прибутку та

мінімізації величини ризику може бути розв'язана стандартними методами багатокритеріальної оптимізації (див., наприклад, [9]). Розв'язок задачі (1) – (3) $q^* = (q_1^*, q_2^*, \dots, q_r^*)$ є таким керуванням вхідним потоком, що максимізує прибуток від роботи мережі та мінімізує величину ризику.

Список використаних джерел

1. *Lebedev E.A., Makushenko I.A.* Optimal distribution of external load for multichannel stochastic networks. – Kyiv: National Library of Ukraine, 2012. – 90 p. (Ukrainian)
2. *Vishnevsky M.V.* The theoretical basis of the design of computer networks. – Moscow: Technosphere, 2003. – 512 p. (Russian)
3. *Wolrend J.* Telecommunications and Computer Networks. – Moscow: Postmarket, 2001. – 480 p.
4. *Massey W.A. and Whitt W.* A stochastic model to capture space and time dynamics in wireless communication systems // Probability in the Engineering and Information Sciences. – 1994. – Vol. 8. – P. 541-569.
5. *Vatutin V.A.* The critical Bellman-Harris branching processes with immigration and several types of particles. Probability theory and its applications. – 1976. – V. 21, № 2. – P. 447-454. (Russian)
6. *Klimov G.P.* Stochastic service system. – Moscow: Nauka, 1966. – 244 p. (Russian)
7. *Kovalenko I.N., Kuznetsov N.Y., Shurenkov V.M.* Random processes. – Kyiv: Naukova dumka, 1983. – 366 p. (Russian)
8. *Sevastyanov B.A.* Branching processes. Moscow: Nauka, 1971. – 436 p. (Russian)
9. *Volkovich V.L., Voloshin A.F., Zaslavsky V.A., Ushakov I.A.* Models and methods of optimization of reliability of complex systems / Pod red. Mikhalevicha V.S. – Kiev: Naukova dumka, 1993. – 312 p. (Russian)

Надійшла до редколегії 17.09.13

УДК 551.24.02 : 624.131.66

Мартинюк П.М.¹, к.ф.-м.н., доц.
Гошко О.В.², магістр

Математична модель фільтраційної консолідації ґрунтів з урахуванням багатофракційної суфозії

Розглянута задача консолидації ґрунтового масиву з врахуванням механічної суфозії на межі контакту двох пластів ґрунту різної фракції. Побудована математична модель досліджуваних процесів з урахуванням впливу тепло-солепереносу.

Ключові слова: математична модель, суфозія, консолидація

¹ Національний університет водного господарства та природокористування, 33000, м. Рівне, вул. Соборна, 11, e-mail: martinjuk@ukr.net

² Національний університет водного господарства та природокористування, 33000, м. Рівне, вул. Соборна, 11, e-mail: esteril@rambler.ru

Martyniuk P.M.¹, Candidate of physics and mathematics sciences
Hoshko A.V.², master

Mathematical model of soils filtration consolidation taking into account multi-grade suffusion

The layered soils consolidation problem has been considered. The mechanical suffusion on the contact of two layers of soil has been included. The mathematical model of the considered problem with taking into account heat and salt transfer has been build.

Key Words: mathematical model, suffusion, consolidation.

¹ National University of Water Management and Nature Resources Use, 33000, Rivne, Soborna str., 11, e-mail: martinjuk@ukr.net

² National University of Water Management and Nature Resources Use, 33000, Rivne, Soborna str., 11, e-mail: esteril@rambler.ru

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

1. Вступ.

В роботах [1, 2] побудовано математичні моделі консолидації ґрунтів з урахуванням впливу техногенних факторів. Процес консолидації ґрунту супроводжується підвищеними надлишковими напорами в порах пористого середовища. Як результат, швидкість фільтрації порової рідини може перевищити критичне значення, при якому частинки ґрунту переходять в рухливий стан. Тому процеси консолидації можуть супроводжуватись процесами фільтраційного руйнування ґрунтів [3, 8].

В повідомленні [17] загалом виділено такі основні типи фільтраційного руйнування ґрунтів: 1) випір під дією висхідного фільтраційного потоку; 2) суфозія; 3) контактний випір; 4) контактний розмив.

В роботах [3, 8] побудовано математичні моделі фільтраційної консолидації ґрунтів та їх контактного розмиву. Контактний розмив – один із видів фільтраційного руйнування, який приводить до утворення зосереджених шляхів

фільтрації в ґрунтових гідротехнічних спорудах та їх основах [9, 10, 16]. Інших типів фільтраційного руйнування там розглянуто не було. Процеси суфозії поділяються на два типи – механічна і хімічна. Вплив хімічної суфозії на фільтраційну консолидацію ґрунтів досліджено наприклад в роботі [11].

В свою чергу, процеси механічної суфозії в ґрунтах поділяють на внутрішню суфозію та зовнішню суфозію [4]. Про це також відмічено в роботах [12, 13].

Якщо ґрунт є неоднорідним і складається із шарів з різними гранулометричним складом, що, в свою чергу, впливає на їх фільтраційні властивості, то окрім контактного розмиву там можуть відбуватись процеси контактного суфозійного випору [5]. В науковій літературі такі процеси названі «контактною суфозією». В даній роботі ми будемо притримуватись такої ж термінології, розуміючи під контактною суфозією взаємопроникнення через межу контакту суфозійних частинок в інше пористе середовище.

Ціллю даної роботи є побудова математичної моделі фільтраційної консолідації ґрунтів з урахуванням контактної суфозії в умовах впливу техногенних факторів.

2. Постановка задачі.

Розглянемо масив ґрунту в області Ω_1 , який привантажений ґрунтом в області Ω_2 більш великої фракції. Під впливом висхідного фільтраційного потоку суфозійні частинки з області Ω_1 можуть проникати в область Ω_2 . В результаті межа контакту двох ґрунтів $\Gamma_{12}(\mathbf{X}, t)$ є рухомою і змінює своє положення в часі. Тому область Ω_2 – це ґрунт, який складається із «скелету» та суфозійних частинок з концентрацією $\sigma(\mathbf{X}, t)$. Під концентрацією $\sigma(\mathbf{X}, t)$ частинок в деякому виділеному об'ємі V пористого середовища будемо розуміти відношення об'єму суфозійних частинок до всього виділеного об'єму V . Тому $\sigma_{\max}(\mathbf{X}, t) = 1 - n_1 \cdot n_2$, де n_i – функції пористості «чистого» ґрунту в областях Ω_i , $i = 1, 2$.

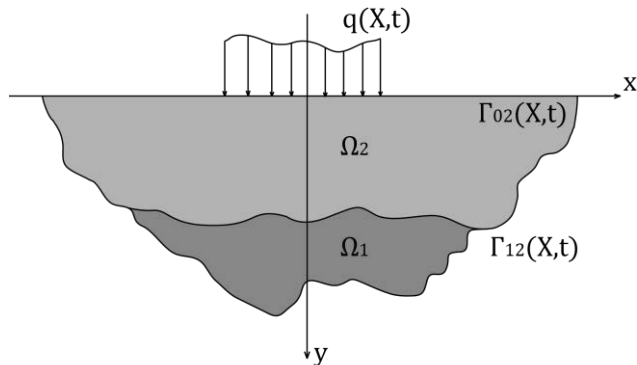


Рис. 1 Фільтраційна консолідація та контактна суфозія в неоднорідному масиві ґрунту

Задача полягає в: 1) виведенні рівняння фільтраційної консолідації з урахуванням суфозії; 2) виведенні рівняння динаміки зміни концентрації $\sigma(\mathbf{X}, t)$ суфозійних частинок в області Ω_2 ; 3) виведенні кінематичної граничної умови, якою описується зміна в часі положення рухомої межі $\Gamma_{12}(\mathbf{X}, t)$; 4) виведенні кінематичної граничної умови, якою описується зміна в часі положення верхньої рухомої межі $\Gamma_{02}(\mathbf{X}, t)$ масиву ґрунту; 5) постановці крайової задачі,

якою буде описуватись математична модель розглядуваної задачі.

3. Рівняння фільтраційної консолідації.

Виділимо елементарний фрагмент ґрунту загальним об'ємом V , який повністю насичений поровою рідиною (газоподібна складова відсутня, або її наявності можна знехтувати). Виділений фрагмент ґрунту буде містити: 1) поровий розчин об'ємом V_n , який дорівнює об'єму пор; 2) тверді структурні частинки об'ємом $V_s^{(0)}$, які утворюють «скелет» пористого середовища; 3) тверді суфозійні частинки об'ємом $V_s^{(i)}$, $i = \overline{1, S}$, де номер i відповідає частинкам певної фракції. Відмітимо, що процеси механічної суфозії при $S=1$ досліджено в роботі [14]. В цій же роботі висловлена ідея розгляду багатofракційних суфозійних частинок.

Нехай $n = \frac{V_n}{V}$ – пористість ґрунту;

$m^{(i)} = \frac{V_s^{(i)}}{V}$ – відносний вміст твердих частинок

i -ї фракції, $i = \overline{0, S}$. Зважаючи на рівність

$V_n + \sum_{i=0}^S V_s^{(i)} = V$, маємо

$$n + \sum_{i=0}^S m^{(i)} = 1. \quad (1)$$

Позначимо через $\mathbf{u}$ – швидкість фільтрації порової рідини (фіктивна швидкість руху); $\mathbf{v}^{(i)}$ – фіктивну швидкість руху твердих частинок ґрунту відповідної фракції, $i = \overline{0, S}$. Тоді, повторюючи міркування наведені в [6], маємо закон Дарсі-Герсеванова

$$\mathbf{u} - e^{(0)} \cdot \mathbf{v}^{(0)} = -\mathbf{K}_h \nabla h(\mathbf{X}, t), \quad (2)$$

де $\mathbf{X} = (x, y, z)$ – точка пористого середовища; t – час; $\mathbf{K}_h$ – коефіцієнт (тензор) фільтрації, який залежить від фізико-хімічних властивостей пористого середовища; $h(\mathbf{X}, t)$ – функція напору;

$$e^{(i)} = \frac{n}{m^{(i)}}, \quad i = \overline{0, S}.$$

Виведення рівняння фільтраційної консолідації повністю повторює етапи виведення в класичній теорії [6]. Маємо: рівняння нерозривності рідкої фази

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0; \quad (3)$$

рівняння нерозривності i -ї твердої фракції

$$\frac{\partial m^{(i)}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}^{(i)} = 0, \quad i = \overline{0, S}. \quad (4)$$

Додаючи рівняння (3) та (4) і враховуючи (1), отримаємо

$$\nabla \cdot \mathbf{u} + \sum_{i=0}^S \nabla \cdot \mathbf{v}^{(i)} = 0. \quad (5)$$

Кожне із трьох співвідношень закону (2) диференціюємо відповідно по змінних x , y та z та додаємо. Маємо

$$\nabla \cdot \mathbf{u} - e^{(0)} \nabla \cdot \mathbf{v}^{(0)} - \mathbf{v}^{(0)} \nabla e = -\nabla \cdot (\mathbf{K}_h \nabla h(\mathbf{X}, t)).$$

Нехтуємо третім доданком в лівій частині вищенаведеної рівності

$$\nabla \cdot \mathbf{u} - e^{(0)} \nabla \cdot \mathbf{v}^{(0)} = -\nabla \cdot (\mathbf{K}_h \nabla h(\mathbf{X}, t)). \quad (6)$$

Враховуючи (5), з (6) отримуємо

$$\sum_{i=1}^S \nabla \cdot \mathbf{v}^{(i)} + (1 + e^{(0)}) \nabla \cdot \mathbf{v}^{(0)} = \nabla \cdot (\mathbf{K}_h \nabla h(\mathbf{X}, t)). \quad (7)$$

Приймаючи до уваги рівняння нерозривності (4), з (7) маємо

$$-\sum_{i=1}^S \frac{\partial m^{(i)}}{\partial t} - (1 + e^{(0)}) \frac{\partial m^{(0)}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{K}_h \nabla h(\mathbf{X}, t)). \quad (8)$$

Далі

$$\begin{aligned} m^{(0)} &= \frac{V_s^{(0)}}{V} = \frac{V_s^{(0)}}{V_s^{(0)} + V_n + \sum_{i=1}^S V_s^{(i)}} = \\ &= \frac{1}{1 + e^{(0)} + \sum_{i=1}^S \frac{V_s^{(i)}}{V_s^{(0)}}} = \frac{1}{1 + e^{(0)} + \frac{1}{m^{(0)}} \sum_{i=1}^S m^{(i)}}, \\ (1 + e^{(0)}) m^{(0)} + \sum_{i=1}^S m^{(i)} &= 1, \end{aligned}$$

$$m^{(0)} = \frac{1}{1 + e^{(0)}} \left(1 - \sum_{i=1}^S m^{(i)} \right).$$

Диференціюючи останню рівність по часу, отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial m^{(0)}}{\partial t} &= -\frac{1}{1 + e^{(0)2}} \left(1 - \sum_{i=1}^S m^{(i)} \right) \frac{\partial e^{(0)}}{\partial t} - \\ &- \frac{1}{1 + e^{(0)}} \sum_{i=1}^S \frac{\partial m^{(i)}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (9)$$

Підставляємо (9) в (8)

$$\begin{aligned} -\sum_{i=1}^S \frac{\partial m^{(i)}}{\partial t} + \frac{1 - \sum_{i=1}^S m^{(i)}}{1 + e^{(0)}} \frac{\partial e^{(0)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^S \frac{\partial m^{(i)}}{\partial t} &= \\ &= \nabla \cdot (\mathbf{K}_h \nabla h(\mathbf{X}, t)), \\ \frac{1 - \sum_{i=1}^S m^{(i)}}{1 + e^{(0)}} \frac{\partial e^{(0)}}{\partial t} &= \nabla \cdot (\mathbf{K}_h \nabla h(\mathbf{X}, t)). \end{aligned} \quad (10)$$

Далі, як і в класичній теорії фільтраційної консолідації, використовуючи принцип гідроємності Герсеванова та основну розрахункову модель Флоріна, з рівняння (10) маємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial h(\mathbf{X}, t)}{\partial t} &= \frac{1 + e^{(0)} \quad 1 + (\bar{r} - 1)\xi}{\bar{r}\gamma a \left(1 - \sum_{i=1}^S m^{(i)} \right)} \times \\ &\times \nabla \cdot (\mathbf{K}_h \nabla h(\mathbf{X}, t)) + \frac{\partial h^*}{\partial t} + \frac{1}{r\gamma} \frac{\partial \Theta^*}{\partial t}. \end{aligned} \quad (11)$$

Тут: $\bar{r}$ - розмірність задачі; a - коефіцієнт стисливості ґрунту; ξ - коефіцієнт бічного тиску ґрунту; γ - питома вага порової рідини; h^* , Θ^* - напори в поровій рідині та сума головних напружень в скелеті ґрунту в умовах повної стабілізації. При виведенні рівняння (11) використовується лінійна компресійна залежність

$$e^{(0)} = -\frac{a\Theta}{1 + (\bar{r} - 1)\xi} + b.$$

За формою рівняння (11) відрізняється від класичного рівняння фільтраційної консолідації лише наявністю в правій частині в знаменнику

множника $\left(1 - \sum_{i=1}^S m^{(i)} \right)$. При відсутності

суфозійних частинок $\sum_{i=1}^S m^{(i)} = 0$ і рівняння (11)

повністю співпадає з класичним.

В законі (2) врахуємо вплив тепло-солепереносу [1, 3]

$$\begin{aligned} \mathbf{u} - e^{(0)} \cdot \mathbf{v}^{(0)} &= -\mathbf{K}_h \nabla h(\mathbf{X}, t) + \\ &+ \mathbf{K}_c \nabla c(\mathbf{X}, t) + \mathbf{K}_T \nabla T(\mathbf{X}, t), \end{aligned} \quad (12)$$

де $c(\mathbf{X}, t)$ - концентрація солей в поровій рідині; $T(\mathbf{X}, t)$ - температура ґрунтового середовища; $\mathbf{K}_c$, $\mathbf{K}_T$ - коефіцієнти хімічного та термічного осмосів, які, як і коефіцієнт фільтрації, можуть мати тензорний характер. Тоді рівняння (11) набуває вигляду

$$\begin{aligned} \frac{\partial h(\mathbf{X}, t)}{\partial t} &= \frac{1 + e^{(0)} \quad 1 + (\bar{r} - 1)\xi}{\bar{r}\gamma a \left(1 - \sum_{i=1}^S m^{(i)} \right)} \times \\ &\times \nabla \cdot (\mathbf{K}_h \nabla h(\mathbf{X}, t) - \mathbf{K}_c \nabla c(\mathbf{X}, t) - \\ &- \mathbf{K}_T \nabla T(\mathbf{X}, t)) + \frac{\partial h^*}{\partial t} + \frac{1}{r\gamma} \frac{\partial \Theta^*}{\partial t}. \end{aligned} \quad (13)$$

Відмітимо, що з рівняння (10) легко можна отримати рівняння фільтраційної консолідації з урахуванням повзучості скелету ґрунту. Здійснюється це аналогічно до класичної теорії [6].

Коефіцієнт K_h залежить від фізико-хімічних характеристик пористого середовища: температури, концентрації солей, надлишкових напорів [1, 3, 8] та концентрацій суфозійних частинок.

Щодо залежності від концентрації суфозійних частинок, то в роботі [14] запропоновано аналог формули Козені-Кармана для коефіцієнта проникливості ґрунту у випадку полідисперсного ґрунту

$$k = \chi^2 \frac{(d^{(0)})^2 n^3}{180(1-n)^2},$$

$$\text{де } \chi = \frac{1 + \sum_{i=1}^S \eta^{(i)}}{1 + \sum_{i=1}^S \eta^{(i)} D^{(i)}}, \quad \eta^{(i)} = \frac{m^{(i)}}{m^{(0)}}, \quad D^{(i)} = \frac{d^{(0)}}{d^{(i)}};$$

$d^{(i)}, i = \overline{0, S}$, - середній діаметр частинок.

4. Рівняння внутрішньої суфозії в області Ω_2 .

Рівняння для опису динаміки зміни концентрації $\sigma^{(i)} X, t$, $i = \overline{1, S}$ як і рівняння тепло-масопереносу (або вологопереносу), виводиться на основі рівняння нерозривності

$$\frac{\partial \sigma^{(i)} X, t}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_i X, t = 0, i = \overline{1, S}. \quad (14)$$

Тут $\mathbf{q}_i X, t$ - вектор-функція, яка задає потік суфозійних часток. Її визначення є не простою задачею. Зазначимо, що в рівнянні нерозривності (14) знехтувано швидкістю руху твердих частинок ґрунту в результаті консолідації. Це обґрунтовується припущенням, що суфозійні частинки в області Ω_2 знаходяться в рухомих, не зв'язному зі «скелетом» стані.

5. Кінематична гранична умова на межі

$$\Gamma_{12} X, t.$$

Межа $\Gamma_{12} X, t$ визначає нижню межу рухомого «скелета» із твердих, несудозійних частинок області Ω_2 . Цей процес можна порівняти із процесами волого-переносу, де межа $\Gamma_{12} X, t$ є межею розділу повністю насиченого та не повністю насиченого ґрунту. Єдина

відмінність - при переході частини вологи із області Ω_1 в область Ω_2 - межа Γ_{12} має рухатись вгору. Тут навпаки - якщо деякий об'єм суфозійних частинок з області Ω_1 перейде в пори крупнозернистого ґрунту в області Ω_2 , то межа Γ_{12} має опускатись вниз - об'єм ґрунту в області Ω_1 зменшиться. Тому, по аналогії із роботою [15] будемо мати

$$m \frac{d\Gamma_{12} X, t}{dt} = - \sum_{i=1}^S \mathbf{q}_i, \mathbf{n}_{12}, \quad (15)$$

де m - аналог недостатці водонасичення в задачі вологоперенесення, а в даному випадку

$$m X, t = \sigma_{\max} - \sum_{i=1}^S \sigma^{(i)} X, t; X \in \Omega_2;$$

$\mathbf{n}_{12}$ - вектор напрямних косинусів зовнішньої нормалі до межі $\Gamma_{12} X, t$ відносно області Ω_1 .

6. Кінематична гранична умова на межі

$$\Gamma_{02} X, t.$$

Особливість зміни положення межі $\Gamma_{02} X, t$ обумовлюється двома факторами: 1) зміною положення межі $\Gamma_{12} X, t$ та 2) зміною об'єму пор за рахунок процесів фільтраційної консолідації. Тобто

$$\frac{d\Gamma_{02} X, t}{dt} = f_1 X, t + f_2 X, t. \quad (16)$$

Другий фактор враховано в роботах [3, 8] при врахуванні лише вертикальних зміщень. Зокрема

$$f_2 X, t = - \frac{\bar{r} \gamma a}{1 + \bar{e}} \frac{1}{1 + \bar{r} - 1} \int_{y_r(X)}^{\varphi X} \frac{\partial h X, t}{\partial t} dy,$$

де $y = \varphi X$ - функція, що задає нижній нерухомий контур; $y_r(X)$ - вертикальна координата межі $\Gamma_{02} X, t$.

Зважаючи на те, що умова (16) буде враховувати лише вертикальні зміщення, в першому факторі (функція $f_1 X, t$) потрібно враховувати це ж саме. Розглянемо рисунок 2. Тоді

$$\Delta \Gamma \approx - \frac{1}{n_y^{12}} \cdot \Gamma_{12} t + \Delta t - \Gamma_{12} t,$$

де n_y^{12} - напрямний косинус нормалі $\mathbf{n}_{12}$. Тобто

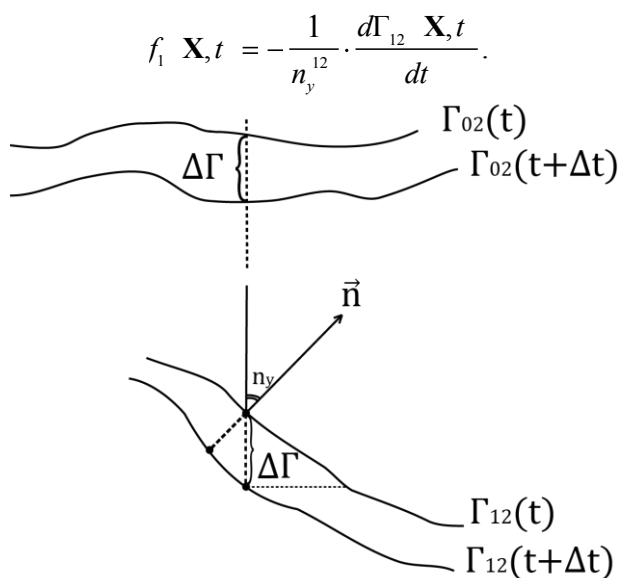


Рис 2. Просідання верхньої межі при контактній суфозії

7. Постановка крайової задачі.

Отже, побудована математична модель буде описуватись наступною крайовою задачею:

$$\frac{\partial h(X,t)}{\partial t} = \frac{(1+e^{(0)})(1+(\bar{r}-1)\xi)}{\bar{r}\gamma a \left(1 - \sum_{i=1}^S m^{(i)}\right)} \times$$

$$\times \nabla \cdot (K_h \nabla h(X,t) - K_c \nabla c(X,t) -$$

$$- K_T \nabla T(X,t)) + \frac{\partial h^*}{\partial t} + \frac{1}{r\gamma} \frac{\partial \Theta^*}{\partial t},$$

$$\nabla \cdot (D(c,T,e) \nabla c(X,t) + \nabla \cdot (D_T \nabla T(X,t) -$$

$$- u \nabla c(X,t) = n \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial t},$$

$$\nabla \cdot (\lambda(c) \nabla T(X,t) - \rho c_p u \nabla T(X,t) = c_T \frac{\partial T}{\partial t},$$

$$\frac{\partial \sigma^{(i)}(X,t)}{\partial t} + \nabla \cdot q^{(i)}(X,t) = 0, \quad i=1, \overline{S}, \quad X \in \bar{\Omega}_2,$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \gamma_1(c - C_m),$$

$$q^{(i)}(X,t) = F(\sigma^{(i)}, \sigma_{max}, u, u_{kr}^{(i)}), \quad X \in \Omega_2,$$

$$u = -K_h \nabla h(X,t) + K_c \nabla c(X,t) + K_T \nabla T(X,t),$$

кінематичні граничні умови

$$\left(\sigma_{max} - \sum_{i=1}^S \sigma^{(i)}(X,t) \right) \frac{d\Gamma_{12}(X,t)}{dt} = - \sum_{i=1}^S q^{(i)} \cdot n_{12},$$

$$\frac{d\Gamma_{02}(X,t)}{dt} = - \frac{1}{n_y} \cdot \frac{d\Gamma_{12}(X,t)}{dt} +$$

$$+ \frac{\bar{r}\gamma a}{1+\bar{e}} \frac{1}{1+\bar{r}-1} \int_{\xi}^{\xi} \frac{\partial h(X,t)}{\partial t} dy,$$

початкові умови

$$h(X,0) = h_0(X), \quad c(X,0) = c_0(X),$$

$$T(X,0) = T_0(X), \quad \sigma^{(i)}(X,0) = \sigma_0^{(i)}(X), \quad i=1, \overline{S}.$$

$$\Gamma_{12}(X,0) = \Gamma_{12}^0(X), \quad \Gamma_{02}(X,0) = \Gamma_{02}^0(X),$$

граничні умови запишемо в абстрактному вигляді і залежать вони від конкретизації постановки задачі

$$h(X,t)|_{\Gamma_1^h} = H_1(X,t), \quad u \cdot n|_{\Gamma_2^h} = 0,$$

$$c(X,t)|_{\Gamma_1^c} = c_1(X,t), \quad (q_c, n)|_{\Gamma_2^c} = 0$$

$$T(X,t)|_{\Gamma_1^T} = T_1(X,t), \quad (q_T, n)|_{\Gamma_2^T} = 0$$

$$\sigma(X,t)|_{\Gamma_{12}} = \sigma_1^{(i)}(X,t), \quad i=1, \overline{S}$$

де $\Gamma_1^C \cup \Gamma_2^C = \Gamma_1^T \cup \Gamma_2^T = \Gamma$ – загальна межа області;

умови спряження мають задаватися на межі контакту $\Gamma_{12}(X,t)$. Припустимо, що на межі $\Gamma_{12}(X,t)$ виконується умова ідеального контакту [7]. Тоді, маємо:

$$h(X,t)|_{\Gamma_{12}} = 0, \quad u \cdot n|_{\Gamma_{12}} = 0,$$

де $\cdot$ – символ стрибка функції. Аналогічно

$$c(X,t)|_{\Gamma_{12}} = 0, \quad q_c \cdot n|_{\Gamma_{12}} = 0,$$

$$T(X,t)|_{\Gamma_{12}} = 0, \quad q_T \cdot n|_{\Gamma_{12}} = 0.$$

Відкритим залишається питання про вигляд функціональної залежності

$$q^{(i)}(X,t) = F(\sigma, \sigma_{max}, u, u_{kr}^{(i)}), \quad i=1, \overline{S}.$$

Наприклад за дану залежність можна взяти

$$q^{(i)} = f(\sigma, \sigma_{max}, u, u_{kr}^{(i)}) \cdot \sigma^{(i)}(X,t) \mp w_i \cdot \nabla z,$$

де w_i – швидкість осідання твердих часток i -ї фракції в вертикальному напрямку; «-» – вісь oz вверх, «+» – вісь oz вниз;

$$f(\sigma, \sigma_{max}, u, u_{kr}) = f_j \frac{\bar{r}}{j=1},$$

$$f_j = \alpha_{er} u - u_{kr} +,$$

де $g_{\pm} = \begin{cases} g, & g \geq 0; \\ 0, & g < 0; \end{cases}$ α_{er} – коефіцієнт

розмиву; u_{kr} – скалярна критична швидкість розмиву.

8. Висновки та напрямки подальшої роботи

Отже, в даній статті побудовано математичну модель фільтраційної консолідації ґрунтів з урахуванням впливу техногенних факторів та багатофракційної контактної механічної суфозії. Далі вимагається адаптація відомих або розробка нових числових методів для ефективного наближеного розв'язання відповідної крайової задачі.

Список використаних джерел

1. *Vlasyuk A.P., Martyniuk P.M.* Mathematical modeling of soil filtration consolidation under filtration of saline fluid in unisothermal conditions. - Rivne: NUVGP, 2008. – 416p. (in Ukrainian)
2. *Bomba A.J., Bulavatsky V.M., Skopetskiy V.V.* Nonlinear mathematical models of geo hydraulics. - Kyiv: Naukova Dumka 2007. – 291p. (in Ukrainian)
3. *Vlasyuk A.P., Martyniuk P.M.* The numerical expression of a filtration consolidation problem of earthen dam taking into account the mass and heat transfer by the radial basis function method. - Rivne: NUVGP, 2010. – 277p. (in Ukrainian)
4. *Dmitriev A.F., Hlapuk N.N., Dmitriev D.A.* Deformation processes in cohesionless soils in close to drainage area and impact on the work of the bilge-humidification systems. Rivne: RSTU, 2002. – 145p. (in Russian)
5. *Istomina V.S.* The filtration resistance of soils. – Moscow: Gosstroizdat, 1957. – 294p. (in Russian)
6. *Ivanov P.L.* Soil and foundation of hydrotechnical construction. Soil Mechanics. - Moscow: Vyshaya Shkola, 1991. – 447p. (in Russian)
7. *Sergienko I.V., Skopetsky V.V., Deineka V.S.* Mathematical modeling and investigation of processes in heterogeneous environments. - Kiev: Nauk. Dumka, 1991. – 432 p. (in Russian)
8. *Vlasyuk A.P., Martyniuk P.M.* The mathematical modeling of soil consolidation with taking into account nonlinear Darcy law, heat and salt transfer. - Mathematical modeling. – 2012. - Vol.24, № 11.-P. 97-112. (in Russian)
9. *Anakhaev K.N., Gegiev K.A., Amshonov B.H.* About failures and damages of earthen weirs with conduits: reasons and methods of perfection of defense. - Hydraulic Engineering. – 2004. - № 3. -P. 30-36. (in Russian)
10. *Radchenko V.G., Radchenko S.V.* Repair earth dam in the event of filtration strength. - Hydraulic Engineering. – 2011. - № 5.-P. 20-26. (in Russian)
11. *Michuta O.R., Vlasyuk A.P., Martyniuk P.M.* Influence of chemical erosion on filtration consolidation of saline soils in nonisothermal condition. - Mathematical modeling. – 2013. - Vol.25, № 2. – P.3-18. (in Russian)
12. *Polyakov V.L.* On the interaction between the particles in the non-structural internal suffusion in humidified cohesionless soils. - Reports of the NAS of Ukraine. – 2008. - № 10. -P. 69-76. (in Russian)
13. *Polyakov V.L.* Generalized accounting effect on the action of seepage deformation drainage. - Applied Hydromechanics. – 2010. - Vol.12, № 4-C. 71-80. (in Russian)
14. *Polyakov V.L.* Mechanical suffusion in soil under drainage. - Applied Fluid Mechanics. – 2002. - Vol.4, № 4-P. 60-73. (in Russian)
15. *Shamansky V.E.* Numerical problem solving unsteady filtration of liquids with free surfaces. - Computational Mathematics and Mathematical Physics – 1970. – Vol.10 (2). - P. 505-514. (in Russian)
16. *Alamdari N.Z., Banahashemi M., Mirghasemi A.* A numerical modeling of piping phenomenon in earth dams // World Academy of Science, Engineering and Technology. – 2010. – 70. – P.45-47.
17. *International Seminar of dams and foundations filtration strength.* - Hydraulic Engineering. – 2009. - № 2.-P. 6-7. (in Russian)

Надійшла до редколегії 18.06.13

УДК 517.929

Василь П. Марценюк¹ д.т.н., проф.,
Надія М. Гандзюк²

**Побудова експоненціальної оцінки
для нелінійної невід'ємної системи із
запізненням на основі
нерівності Хейла – Лунела.**

Анотація. Досліджено нелінійну невід'ємну систему диференціальних рівнянь із запізненням та побудовано експоненціальну оцінку на основі нерівності Хейла – Лунела.

Ключові слова: нелінійна система, невід'ємна система, запізнення.

¹Тернопільський державний медичний університет імені І.Я. Горбачевського, м. Тернопіль, вул. Майдан Волі, 1, 46001

e-mail: marceniuk@yahoo.com

²Тернопільський державний медичний університет імені І.Я. Горбачевського, м. Тернопіль, вул. Майдан Волі, 1, 46000

e-mail: nadiagan84@gmail.com

Статтю представив д.т.н., проф. Акіменко В.В.

Вступ.

В останні роки значна увага приділяється розвитку теорії динамічних систем.

Велику роль для розвитку теорії динамічних систем відіграли дослідження, які проводились в Україні ще наприкінці XIX століття О.М.Ляпуновим. В середині 30-х років XX століття М.М. Крилов і М.М. Боголюбов зробили важливий внесок в загальну теорію динамічних систем. За останні 45 років в розвиток теорії динамічних систем та її застосування в прикладних науках для дослідження різноманітних еволюційних задач з нелінійною динамікою зробили: Шарковський О.М., Чуєшов І.Д., Коробов, В.І., Безуглий С.І., Даниленко О.І., Коляда С.Ф., Романенко О.Ю., Майстренко Ю.Л., Теплінський О.Ю., Федоренко В.В. [2]

Нелінійні та компартментні динамічні системи широко поширені в біологічних та фізичних науках. Вони відіграють ключову роль в розумінні багатьох процесів, котрі відбуваються навколо нас. Область застосування невід'ємних і компартментних систем не

*Vasyl P. Martsenyuk¹ Doctor of Sciences (Technics), Full Professor,
Nadia M. Gandzyuk²*

**Construction of exponential estimates
for nonlinear nonnegative system with delays
based on Hale – Lunel inequality.**

Annotation. Investigated nonlinear nonnegative system of differential equations with delay and build an exponential estimation based on Hale - Lunel inequality.

Key words: nonlinear system, nonnegative system, time delay.

¹I.Ya. Horbachevsky Ternopil State Medical University, Ternopil, m.Voli str, 1, 46001
e-mail: marceniuk@yahoo.com

²I.Ya. Horbachevsky Ternopil State Medical University, Ternopil, m.Voli str, 1, 46001
e-mail: nadiagan84@gmail.com

обмежується біологічними та медичними системами. Їх широко використовують у системах хімічних реакцій, системах масового обслуговування, екологічних системах, економічних системах.

Для того, щоб точно описати еволюцію вище згаданих систем потрібно враховувати для будь – якої математичної моделі динамічної системи історію попередніх станів системи [3].

Оскільки дослідження нелінійних систем сьогодні є актуальним та потребує уваги, тому метою роботи є розглянути нелінійну систему диференціальних рівнянь із запізненням, а також запропонувати метод побудови експоненціальної оцінки розв'язку на основі нерівності Хейла – Лунела.

В роботі досліджуватимемо приклад невід'ємної системи. Такі моделі виникають при вивченні реальних медико – біологічних компартментних процесів [2-6].

Побудова експоненціальної оцінки.

Отже, розглянемо невід'ємну систему

$$\frac{dx}{dt} = Ax(t) + \sum_{i=1}^{n_d} f_{d_i}(x(t - \tau_i)), t > 0 \quad (1)$$

$$x(t) = \varphi(t) \quad t \in [-\tau_{\max}, 0]$$

де $x(t) \in R^n$, $A \in R^{n \times n}$ – суттєво невід’ємна матриця, $f_{d_i} \in R^{n \times n}$, $i = \overline{1, n_d}$ – вектор - функція, $\tau_{\max} = \max\{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{n_d}\}$; $\varphi(t) \geq 0$, $t \in [-\tau_{\max}, 0]$ – покомпонентно невід’ємна функція.

Означення 1. [1] Матриця $A = \{a_{ij}\} \in R^{n \times n}$ називається невід’ємною, якщо $a_{ij} \geq 0$, $i, j = \overline{1, n}$.

Означення 2. [1] Матриця $A = \{a_{ij}\} \in R^{n \times n}$ називається суттєво невід’ємною, якщо $a_{ij} \geq 0$, $i, j = \overline{1, n}$, $i \neq j$.

При побудові наступної експоненціальної оцінки використаємо нерівність Хейла – Лунела.

Нерівність Хейла – Лунела. Нехай $u(t)$ і $\alpha(t)$ – дійснозначні неперервні функції на $[a, b]$, $\beta(t) \geq 0$ – інтегрована на $[a, b]$ функція, такі, що

$$u(t) \leq \alpha(t) + \int_a^t \beta(s)u(s)ds, \quad a \leq t \leq b$$

Тоді

$$u(t) \leq \alpha(t) + \int_a^t \alpha(s)\beta(s)e^{\int_s^t \beta(\theta)d\theta} ds, \quad a \leq t \leq b$$

Якщо $\alpha(t)$ – неспадна функція, тоді

$$u(t) \leq \alpha(t)e^{\int_a^t \beta(\theta)d\theta}, \quad a \leq t \leq b$$

Отже, для нелінійної системи диференціальних рівнянь із запізненням (1) із врахуванням певних умов сформулюємо наступну теорему.

Теорема. Якщо для системи (1) виконуються умови:

- 1) існує стала $\gamma > 0$, така, що:

$$\sum_{i=1}^{n_d} f_{d_i}(x) \leq \gamma x \quad (2)$$

- 2) існує вектор $r > 0$, причому $r > p$ для деякого $p > 0$, такого що:

$$p(A^T + \mathcal{A}) + r = 0 \quad (3)$$

Тоді має місце така експоненціальна оцінка:

$$p^T x(t) \leq Ke^{\left(\left\lfloor e^{\tau_{\max}} - 1 \right\rfloor \gamma - 1\right)t}, \quad t \geq 0. \quad (4)$$

Доведення. Розглянемо функціонал:

$$V(x_t) = p^T x(t) + \sum_{i=1}^{n_d} \int_{-\tau_i}^0 p^T f_{d_i}(x_t(s))ds \quad (5)$$

де $p > 0$ – покомпонентно додатний вектор із R_+^n .

Тоді

$$\begin{aligned} \frac{dV(x_t)}{dt} &= p^T \left(Ax(t) + \sum_{i=1}^{n_d} f_{d_i} x(t - \tau_i) \right) + \\ &+ \sum_{i=1}^{n_d} p^T f_{d_i} x(t) - \sum_{i=1}^{n_d} p^T f_{d_i} x(t - \tau_i) = \\ &= p^T \left(Ax(t) + \sum_{i=1}^{n_d} f_{d_i} x(t) \right) \leq \\ &\leq p^T Ax(t) + p^T \gamma x(t) = p^T (A + \gamma I) x(t) \end{aligned} \quad (6)$$

де I – одинична матриця.

Нехай існує вектор $r > 0$, такий що:

$$p(A^T + \mathcal{A}) + r = 0$$

Тоді, продовжуючи вираз (6), отримаємо:

$$\frac{dV(x_t)}{dt} \leq -r^T x(t) \quad (7)$$

В силу припущення $r > p$. Враховуючи невід’ємність $x(t)$ маємо:

$$\begin{aligned} \frac{dV(x_t)}{dt} &\leq -p^T x(t) = \\ &= -p^T x(t) + \gamma p^T \int_{-\tau_i}^0 x_t(s)ds - \gamma p^T \int_{-\tau_i}^0 x_t(s)ds \leq (8) \\ &\leq -V(x_t) + \gamma p^T \int_{-\tau_{\max}}^0 x_t(s)ds. \end{aligned}$$

Помноживши останній вираз на e^t отримаємо

$$\frac{d[V(x_t)e^t]}{dt} \leq \gamma p^T e^t \int_{-\tau_{\max}}^0 x_t(s)ds. \quad (9)$$

Проінтегрувавши (9) на відрізку $[0; t]$, отримаємо:

$$V(x_t)e^t \leq V(x_0) + \int_0^t \int_{-\tau_{\max}}^0 \gamma p^T e^\theta x_\theta(s)dsd\theta. \quad (10)$$

Змінивши порядок інтегрування в нерівності (10) отримаємо:

$$\begin{aligned}
 L &= \int_0^t \int_{-\tau_{\max}}^0 \gamma p^T e^{\theta} x_{\theta}(s) ds d\theta = \\
 &= \int_0^t \int_{\theta=-\tau_{\max}}^0 \gamma p^T e^{\theta} x(s_1) ds_1 d\theta = \\
 &= \int_{-\tau_{\max}}^t \int_{s_1}^{s_1+\tau_{\max}} \gamma p^T e^{\theta} x(s_1) ds_1 d\theta = \\
 &= \int_{-\tau_{\max}}^0 \int_{s_1}^{s_1+\tau_{\max}} \gamma p^T e^{\theta} x(s_1) ds_1 d\theta + \\
 &+ \int_0^t \int_{s_1}^{s_1+\tau_{\max}} \gamma p^T e^{\theta} x(s_1) ds_1 d\theta \leq \\
 &\leq \gamma p^T [e^{\tau_{\max}} - 1] \int_{-\tau_{\max}}^0 x(s_1) ds_1 + \\
 &+ \gamma p^T [e^{\tau_{\max}} - 1] \int_0^t e^{s_1} x(s_1) ds_1
 \end{aligned} \quad (11)$$

Об'єднавши нерівності (10) і (11), і отримаємо:

$$\begin{aligned}
 V(x_t) e^t &\leq V(x_0) + \gamma p^T [e^{\tau_{\max}} - 1] \int_{-\tau_{\max}}^0 x(s_1) ds_1 + \\
 &+ \gamma p^T [e^{\tau_{\max}} - 1] \int_0^t e^{s_1} x(s_1) ds_1
 \end{aligned} \quad (12)$$

Виходячи із виду функціоналу (5) та припущення про невід'ємність системи (1) маємо:

$$V(x_t) \geq p^T x(t) \quad (13)$$

Із нерівності (12) випливає, що:

$$\begin{aligned}
 p^T x(t) e^t &\leq V(x_0) + \gamma p^T [e^{\tau_{\max}} - 1] \int_{-\tau_{\max}}^0 x(s_1) ds_1 + \\
 &+ \gamma p^T [e^{\tau_{\max}} - 1] \int_0^t e^{s_1} x(s_1) ds_1
 \end{aligned} \quad (14)$$

Використавши для (14) нерівність Хейла – Лунела де:

$$\begin{aligned}
 u(t) &= p^T x(t) e^t \\
 \alpha(t) &= K \\
 \beta(s) &= \gamma [e^{\tau_{\max}} - 1] \\
 a &= 0
 \end{aligned} \quad (15)$$

отримаємо:

$$p^T x(t) e^t \leq K e^{\int_0^t [e^{\tau_{\max}} - 1] \gamma d\theta} = K e^{[e^{\tau_{\max}} - 1] \gamma t}, \quad t \geq 0,$$

тобто

$$p^T x(t) \leq K e^{([e^{\tau_{\max}} - 1] \gamma - 1)t}, \quad t \geq 0.$$

Теорему доведено.

Приклад. Розглянемо систему на основі динаміки Міхаеліса – Ментена:

$$\begin{aligned}
 x_1'(t) &= -(a_{11} + a_{21} + a_{31})x_1(t) + \\
 &+ a_{12} \frac{x_2(t - \tau_1)}{x_2(t - \tau_1) + K_{12}^m} + a_{13} \frac{x_3(t - \tau_2)}{x_3(t - \tau_2) + K_{13}^m}; \\
 x_2'(t) &= -a_{12}x_2(t) + a_{21} \frac{x_1(t - \tau_1)}{x_1(t - \tau_1) + K_{21}^m}; \\
 x_3'(t) &= -a_{13}x_3(t) + a_{31} \frac{x_1(t - \tau_2)}{x_1(t - \tau_2) + K_{31}^m}; \quad t \geq 0 \\
 x(t) &= \varphi(t), \quad t \in [-\tau_{\max}, 0]
 \end{aligned} \quad (16)$$

Система (16) може бути представленою у вигляді (1), де:

$$A = \begin{pmatrix} -(a_{11} + a_{21} + a_{31}) & 0 & 0 \\ 0 & -a_{12} & 0 \\ 0 & 0 & -a_{13} \end{pmatrix},$$

$$f_{d_1}(x(t)) = \begin{pmatrix} a_{12} \frac{x_2(t)}{K_{12}^m} \\ a_{21} \frac{x_1(t)}{K_{21}^m} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$f_{d_2}(x(t)) = \begin{pmatrix} a_{13} \frac{x_3(t)}{K_{13}^m} \\ 0 \\ a_{31} \frac{x_1(t)}{K_{31}^m} \end{pmatrix}.$$

Тоді

$$\begin{aligned}
 f_{d_1}(x(t)) + f_{d_2}(x(t)) &< \begin{pmatrix} a_{12} \frac{x_2(t)}{K_{12}^m} + a_{13} \frac{x_3(t)}{K_{13}^m} \\ a_{21} \frac{x_1(t)}{K_{21}^m} \\ a_{31} \frac{x_1(t)}{K_{31}^m} \end{pmatrix} = \Gamma \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

де

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & \frac{a_{12}}{K_{12}^m} & \frac{a_{13}}{K_{13}^m} \\ \frac{a_{21}}{K_{21}^m} & 0 & 0 \\ \frac{a_{31}}{K_{31}^m} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Характеристичний поліном $\chi(\lambda)$ матриці Γ має вигляд:

$$\chi(\lambda) = -\lambda^3 + \left(\frac{a_{12}}{K_{12}^m} \cdot \frac{a_{21}}{K_{21}^m} + \frac{a_{13}}{K_{13}^m} \cdot \frac{a_{31}}{K_{31}^m} \right) \lambda,$$

коренями якого будуть три власні значення

$$\lambda_1 = 0, \lambda_{2,3} = \pm \sqrt{\frac{a_{12}}{K_{12}^m} \cdot \frac{a_{21}}{K_{21}^m} + \frac{a_{13}}{K_{13}^m} \cdot \frac{a_{31}}{K_{31}^m}}.$$

Отже

$$\Gamma x(t) << \gamma x(t),$$

де

$$\gamma = \sqrt{\frac{a_{12}}{K_{12}^m} \cdot \frac{a_{21}}{K_{21}^m} + \frac{a_{13}}{K_{13}^m} \cdot \frac{a_{31}}{K_{31}^m}}.$$

Остаточна оцінка матиме вигляд:

$$p^T x(t) \leq Ke^{\left[e^{\tau_{\max}} - 1 \right] \sqrt{\frac{a_{12}}{K_{12}^m} \cdot \frac{a_{21}}{K_{21}^m} + \frac{a_{13}}{K_{13}^m} \cdot \frac{a_{31}}{K_{31}^m}} t}, \quad t \geq 0.$$

Висновки. В роботі розглянута нелінійна невід'ємна система диференціальних рівнянь із запізненням, для якої побудовано експоненціальну оцінку на основі нерівності Хейла – Лунела. Результат досліджень підсилено практичним прикладом системи на основі динаміки Міхаеліса – Ментена.

Список використаних джерел

1. *Martsenyuk V.P., Gandzyuk N.M.* Method of construction of stability estimate for compartmental model with time delay // *Cybernetics and Systems Analysis.*//2013./№1./P.96-102. (in Russian).
2. *Martsenyuk V.P., Andrushchak I.Ye, Gandzyuk N.M.* Construction of exponential estimates for compartmental system with distributed delays: an approach based on Hale - Lunel inequality. // *Cybernetics and Systems Analysis.*//2013./№3./P.26-31. (in Russian).
3. *Martsenyuk V.P., Gandzyuk N.M.* About of exponential estimates for linear stationary system with delay as the solution of the difference equation// *Taurida Journal of Computer Science Theory and Mathematics.*/2012./№2./C.55-64. (in Ukrainian).
4. *Martsenyuk V.P., Gandzyuk N.M.* About of construction of exponential estimates for system with delay./ *Martsenyuk V.P., Gandzyuk N.M.* // XVI International Conference «Dynamical System Modelling and Stability Investigation», May 29-31 2013 Kiev: proceedings - 110p. (in Ukrainian).
5. *Khusainov D.Y., Kharchenko I.I., Shatyрко A.V.* Fundamentals of Modeling Dynamic Systems– Kiev - 2004. (in Ukrainian).
6. *Haddad W.M, Chellaboina V.* Stability theory for nonnegative and compartmental dynamical systems with time delay // *Systems and Control Letters* - 2001. – №51. – С. 355-361.

Надійшла до редколегії 09.09.2013р.

УДК 681.3

Олександр О. Марченко, к.ф.-м.н., доц.

**Алгоритм конвертації дерева
залежностей у керуючий простір
синтаксичної структури речення**

Стаття описує новий алгоритм конвертації дерева залежностей та дерева виведення англомовного речення у таку універсальну й потужну структуру, як керуючий простір синтаксичної структури речення.

Ключові слова: синтаксичний аналіз, дерева залежностей, керуючий простір синтаксичних структур речення.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: rozenkrans@yandex.ua

Oleksandr O. Marchenko, Ph.D. (Physics & Mathematics), Associate Professor

Algorithm for converting dependency tree to the control space of syntactic structure of the sentence

The paper describes a new algorithm for converting dependency tree and parse tree of English sentence to such universal and useful structure as control space of syntactic structure of sentence.

Key words: syntactic analysis, dependency trees, artificial intelligence, control space of syntactic structure of the sentence.

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: rozenkrans@yandex.ua

Статтю представив чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

Основні синтаксичні конструкції речень природної мови були описані в класичних схемах граматики мови, які відносяться до періоду античності і мало змінилися до теперішнього часу.

Досить тонкі відношення керування між словами виражаються у відомих лінгвістичних моделях дерев підпорядкування (дерев залежностей) і систем складових, що з'явилися в 1950-х. Очевидною перевагою перерахованих моделей є їх коректність – адекватне відображення тих чи інших специфічних характеристик синтаксичної структури речення. При цьому дані моделі не позбавлені недоліків. Модель дерев підпорядкування (дерев залежностей) орієнтована на керуючі зв'язки тільки між словами, а модель систем складових враховує ієрархічне відношення вкладеності словосполучень в лінійній структурі тексту. Ці чинники лише наближено описують дійсні

комунікативні властивості, що містяться в синтаксичних структурах.

Спроби побудови більш зручних для машинної обробки моделей, узагальнюючих властивості дерев підпорядкування і систем складових, призвели до створення моделі системи компонент А.С.Наріньяні [1] та синтаксичних груп А.В.Гладкого [2]. В цих моделях відбувається переміщення кута зору на синтаксичні структури з лінійного порядку, навіязаного послідовністю запису тексту, до складного простору, утвореного синтаксично зв'язаними групами об'єктів. А.В. Анісімов запропонував перейти до простору представлення, не залежного від порядку запису тексту, а значить і від національної мови, який виражає всі предикативні та синтагматичні відношення, що містяться в синтаксичних структурах. Цей простір назвали керуючим [3].

Розглянемо запропоновану алгоритмічну модель речення природної мови. На відміну від суто лінгвістичного підходу, речення

розглядається як деякий динамічний обчислювальний рекурсивний процес, який розвивається в керуючому просторі, що пов'язує синтаксично згруповані частини речення інформаційними каналами. Структура керуючого простору відображає семантику синтагматичних і предикативних конструкцій мови.

Крім властивості давати імена об'єктам навколишнього світу, мова володіє фундаментальною властивістю виражати динамічні відношення, в які вступають об'єкти. Так, дієслово пов'язує у відношення об'єкти, що беруть участь у схемі дії цього дієслова, прикметник задає відношення об'єкта з самим собою. З синтаксичної моделі ми повинні знати, які частини речення пов'язані між собою через відношення і якого типу ці відношення. Існують два види синтаксичних відношень - предикативні і синтагматичні. Предикативне відношення виражає залежність між синтаксичними об'єктами через поняття, що означає дію і зазвичай виражається за допомогою присудка. Синтагма — це поєднання двох синтаксичних об'єктів, з яких один є визначенням іншого, тому в моделі повинні повністю виражатися саме ці типи відношень. Крім того, в широкому розумінні синтагми повинні утворювати синтаксичні групи.

Адекватна модель синтаксичної структури повинна також відображати основну властивість рекурсивності мови - здатність розгортати власні визначення, тобто давати уточнення, характеристики, коментарі до своїх частин, а також будувати визначення визначень.

Перш за все, треба зупинитися на ролі керуючих зв'язків між словосполученнями. Навмисно порушується традиційний лінгвістичний підхід, при якому присудок вважається головним членом речення, від якого йдуть керуючі зв'язки. Для побудови даної моделі зручніше задавати синтаксичні відношення зв'язками генерації і передачі відношень. При цьому досягається більш точна характеристика керуючих зв'язків у порівнянні з традиційним підходом.

Якщо два об'єкти А і В вступають у відношення С, то ми виділяємо об'єкт (припустимо А), що викликає (ініціює, породжує) це відношення С і об'єкт, на який передається це відношення — В. Таким чином, виділяємо два види спрямованих зв'язків: від *об'єкта-генератора відношення до відношення* і від *відношення до підпорядкованого об'єкту*. Перший тип зв'язку називаємо α -зв'язком (зв'язок генерування), другий — β -зв'язком (зв'язок розповсюдження). Об'єкти А, В і відношення С розміщуються в точках керуючого простору, і тому графічне представлення відношення С, що зв'язує А і В, має вигляд, зображений на рисунку 1.



Рис. 1. Об'єкт А генерує відношення С, яке передається на об'єкт В

Дієслова визначають відношення між об'єктами. Тому в стандартній схемі простого речення: «іменник - дієслово - іменник» α -зв'язок спрямований від першого іменника до дієслова, а β - зв'язок спрямований від дієслова до іменника-визначення. Розглянемо приклад: *Kim їсть м'ясо*. Об'єкт *kim* генерує відношення *їсть* і направляє його на об'єкт *м'ясо*. Тому $\alpha - \beta$ - структура цього речення має вигляд, як показано на рисунку 2.

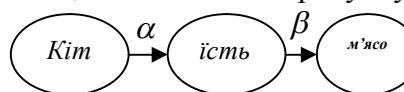


Рис. 2. КП синтаксичної структури речення *Kim їсть м'ясо*

Розглянемо фразу: *Рудий kim*. Тут об'єкт *kim* генерує унарне відношення *рудий* і передає це відношення собі, як показано на рисунку 3. Виникає кільцевий зв'язок, що характеризує визначення.

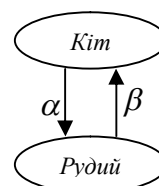


Рис. 3. КП структури словосполучення *рудий kim*

Аналогічно міркуючи, для фрази *Рудий кіт швидко їсть м'ясо* отримуємо наступну структуру, яка показана на рисунку 4.

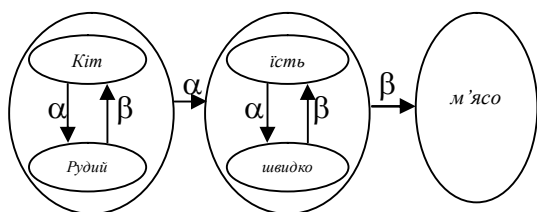


Рис. 4. КП синтаксичної структури речення *Рудий кіт швидко їсть м'ясо*

Речення мають два типи α - β - зв'язків: строго лінійна залежність і замкнута кільцева залежність. Першу називають лінійною конструкцією, другу – визначенням. Перша відповідає предикативним конструкціям мови, друга синтагматичним.

За допомогою рекурсивності керуючий простір може виразити синтаксичні структури довільної складності в аспекті глибини та вкладеності груп.

При обробці синтаксичних структур природної мови виникають два основні завдання – аналіз і синтез. Завдання аналізу – за наявним лінійним записом тексту побудувати відповідний КП, завдання синтезу – за наявним КП побудувати відповідну лінійну послідовність тексту. Друге завдання, взагалі кажучи, простіше. При відображенні лінійної залежності в текст алгоритм синтезу слідує послідовності α - β -зв'язків. При синтезі тексту з визначень спочатку вирішується, що видається раніше – головний об'єкт або його уточнення. Після вирішення цього питання відбувається видача тексту з відповідних конструкцій, які утворюють визначення. В алгоритмі аналізу йде багаторазова згортка визначень і виділення лінійних залежностей.

Алгоритм конвертації дерева залежностей та дерева виведення речення в керуючий простір синтаксичної структури речення

Входом алгоритму є дерево зв'язків залежностей та дерево виведення вхідного речення англійською мовою. Алгоритм

конвертує зв'язки залежностей, отримані на виході Стенфордського парсеру[4], в α - та β -зв'язки керуючого простору синтаксичної структури речення. При цьому всі точки керуючого простору взаємно однозначно відповідають вузлам дерева виведення із чітким врахуванням ієрархії його структури.

Візьмемо в якості прикладу речення «The chef cooks the soup». Стенфордський парсер після аналізу генерує дерево виведення цього вхідного речення :

```
(ROOT
(S
(NP (DT the) (NN chef))
(VP (VBZ cooks)
(NP (DT the) (NN soup)))));
```

та дерево зв'язків залежностей:

```
det(chef-2, the-1)
nsubj(cooks-3, chef-2)
root(ROOT-0, cooks-3)
det(soup-5, the-4)
dobj(cooks-3, soup-5).
```

Алгоритм конвертації вищенаведених структур у керуючий простір синтаксичної структури речення повинен послідовно обійти дерево виведення, породжуючи у кожному вузлі відповідну йому точку КП. Причому зв'язки з дерева залежностей потрібно замінювати на відповідні α - та β -зв'язки керуючого простору. Для цього потрібно множині зв'язків залежностей поставити у відповідність α - та β -зв'язки лінійних чи кільцевих конструкцій синтаксичної структури. Для 53 відношень залежностей, які підтримуються Стенфордським парсером[5], були підібрані відповідні їм α - та β -зв'язки керуючого простору. Нижче представлені деякі з правил конвертації залежностей у α - та β -зв'язки, які утворюють **базу правил** конвертору.

abbrev: abbreviation modifier – модифікатор аббревіатури

Модифікатор аббревіатури NP: ця група іменника служить для скорочення NP (або для визначення аббревіатури).

“The British Broadcasting Corporation (BBC)”
abbrev(Corporation, BBC) – відповідає
кільцевому α - β -зв’язку (зв’язку уточнення)
 $Corporation - \alpha \rightarrow BBC - \beta \rightarrow Corporation$

acompl: adjectival complement –
прикметникове доповнення
Прикметникове доповнення дієслова – це
прикметникова фраза, її функція –
доповнення (як об’єкт дієслова).
She looks very beautiful. acompl(looks,
beautiful)

Відповідає β -зв’язку (від дієслова до
прикметника) лінійної предикативної α - β -
конструкції.

Looks – $\beta \rightarrow$ beautiful

det: determiner – визначник

Визначник – це відношення між головою
NP та його визначником.

“The man is here” det (man, the)

“Which book do you prefer?” det (book,
which)

Відповідає кільцевому α - β -зв’язку
(зв’язку уточнення).

nsubj: nominal subject – номінальний підмет

Номінальний підмет – це іменникова група,
яка є підметом клаузи.

“Clinton defeated Dole”

nsubj (defeated, Clinton) – відповідає α -зв’язку
лінійної предикативної α - β -конструкції від
другого елементу пари до першого.

doobj: direct object – прямий додаток

Прямий додаток VP – це іменникова група,
яка є безпосереднім додатком дієслова.

“They win the lottery” doobj(win, lottery)

Відповідає β -зв’язку лінійної предикативної
 α - β -конструкції.

Наведемо структуру даних для алгоритму
конвертації дерева залежностей та дерева
виведення речення у КП його синтаксичної
структури:

```
class ParseTreeNode {
    public String NodeWord;
    public String NodeTag;
    public ParseTreeNode Left;
    public ParseTreeNode Right;}
```

```
class ControlPoint {
    public Integer NodeID;
    public String PointSyntax;
    public String PointSemantic;
}
```

```
class Relation {
    Integer Node1ID;
    Integer Node2ID;
    Integer RelationType;
}
```

```
class ControlSpace extends ControlPoint {
    public ArrayList<ControlPoint>
    ControlPoints;
    public ArrayList<Relation> Relations;
}
```

GenSpace – основна процедура алгоритму
конвертації. Вона рекурсивно обходить зліва
направо дерево виведення речення,
формує у кожному вузлі відповідну йому
точку КП та трансформуючи зв’язки
залежностей між елементами лівого та
правого піддерева у α - β -зв’язки керуючого
простору поточної точки.

Procedure GenSpace (Tnode: ParseTreeNode;
var Semantic:lexeme; var CSpace:
ControlSpace);

```
Var Syntax1, Syntax2 : TypeofSyntGroup;
Var Semantic1, Semantic2 :String;
Var Cs1,Cs2: ControlSpace;
```

Begin

If Tnode not leaf then

Begin

Syntax1:=Tnode.Left. NodeTag;

GenSpace(Tnode.Left, Semantic1,Cs1)

Syntax2:=Tnode.Right. NodeTag;

GenSpace(Tnode.Right, Semantic2, Cs2)

FindRule(Semantic1, Semantic2, Syntax1,
Syntax2, Rule); {знайти в дереві залежностей
зв’язок, який поєднує Semantic1 та Semantic2, і по
цьому зв’язку знайти у базі правил правило Rule,
що описує, яким чином мають об’єднуватися
відповідні точки в КП: або кільцевим зв’язком,
або α - чи β - лінійним предикативним зв’язком}

Semantic:= MainConcept(Rule, Semantic1, Semantic2);{згідно правила Rule та зв'язку з дерева залежностей Стенфордського парсера визначається, яке слово-значення – Semantic1 з лівого піддерева чи Semantic2 з правого піддерева – є головним значенням новоутвореної точки КП. У дереві залежностей у зв'язках головний елемент пари, як правило, стоїть на першому місці, що є зручною підказкою. Головне слово наслідуються створеним вузлом, або інтегрується нове словосполучення з Semantic1, Semantic2, наприклад *Майдан Незалежності* чи *Імператорський пінгвін* }.

MSpace:= CreatePoint1(Rule, Semantic, Cs1, Cs2);
{генерується точка КП, яка в розгорнутому вигляді представляє собою об'єднання двох підпросторів Cs1 и Cs2 за допомогою або кільцевого синтагматичного зв'язку, або α - чи β -лінійного предикативного зв'язку; нова утворена точка простору отримує своє семантичне значення Semantic – головний елемент з пари (Semantic1, Semantic2) або стійке словосполучення, що утворюється об'єднанням Semantic1 та Semantic2, наприклад "соляна кислота" чи "San Francisco". Нова точка простору отримує своє синтаксичне значення Tnode.NodeTag }

```
End else
If Tnode is leaf then
Begin
    Semantic:=Tnode.Word;
    MSpace:=CreatePoint0(Tnode.NodeTag,
Semantic)
```

{створити точку керуючого простору, синтаксичним значенням точки стає категорія Tnode. NodeTag, семантичним значенням – слово Semantic (тобто Tnode. NodeWord) }

```
end
End.
```

Приклад роботи функції MainConcept
NP → D N головним є N
VP → V NP головним є V

Алгоритм конвертації буде наступний керуючий простір вхідного речення *The chef cooks the soup*:

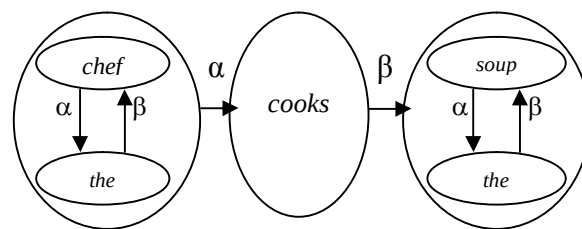


Рис. 5. Результат роботи алгоритму конвертації дерева залежностей та дерева виведення речення «The chef cooks the soup» у КП його синтаксичної структури

Треба відмітити, що дерево виведення Стенфордського парсеру не завжди задовольняє по структурі вимозі бінарності, яку накладає на дерево вищенаведений алгоритм. В даному випадку у таких місцях порушення вимоги (наприклад, там, де вузол NP може мати більш ніж 2 синівських термінальних вузла-листка) можна локально використати висхідний алгоритм аналізу типу алгоритму синтаксичного аналізу Кока-Янгера-Касамі[6, 7, 8].

Входом такої спеціальної процедури є підпоследовність послідовності слів речення. Наприклад: «The white rabbit» з речення «The white rabbit jumped into the hole», де в результаті аналізу генерується дерево

```
(ROOT
(S
(NP (DT The) (JJ white) (NN
rabbit))
(VP (VBD jumped)
(PP (IN into)
(NP (DT the) (NN hole))))))
```

і підмет NP має трьох синів ((DT The) (JJ white) (NN rabbit))

Розглянемо роботу алгоритму побудови КП синтаксичної структури даного словосполучення.

```
For i:=1 to n-1 do
For j:=0 to n-i-1 do
For k:=0 to i-1 do
If relation_exists(t[k,j],t[i-k-1,j+k+1])
{Якщо в дереві залежностей існує зв'язок між
словами B та C, де B ∈ t[k,j] та C ∈ t[i-k-
1,j+k+1]}
then
```

begin

Тоді додаємо в $T[i, j]$ керуючий простір, який утворюється в результаті поєднання точок-просторів з $t[k, j]$ та $t[i-k-1, j+k+1]$ відповідним зв'язком з **бази правил** (або α - β -кільцевим або α - чи β - предикативним). Поєднання відбувається лише у випадку, якщо у дереві виведення речення (дереві стенфордського парсеру) існує така вершина, що розкладається у відповідний новоутвореному КП термінальний ланцюжок.

Наприклад для речення *The strongest rain ever recorded in India shut down the financial hub of Mumbai.*

Існують зв'язки
prep(recorded-5, in-6)
robj(in-6, India-7)

Але в дереві виведення немає такого нетермінального вузлу, який би розкладався у термінальний ланцюжок **recorded in**. У дереві виведення є нетермінальний вузол, який розкладається у термінальний ланцюжок **in India** та вузол, який розкладається у термінальний ланцюжок **recorded in India**. І ця перевірка є фільтром, який дозволяє не утворювати зайві некоректні керуючі простори.

Після утворення нової точки простору вона наслідує нетермінал з відповідного їй вузлу дерева виведення речення. Також визначається головне слово утвореної точки простору.

End;

Використання даної процедури у вищенаведеному алгоритмі в якості вкраплення в місцях порушення бінарності дерева виведення робить алгоритм конвертації більш ефективним, гнучким та універсальним.

Описаний алгоритм був програмно реалізований на мові Java. Програма пройшла тестування на корпусах речень різного ступеня складності (речення з простою структурою, речення середньої складності, речення із складною граматичною структурою). Оцінки точності побудови КП синтаксичних структур речень,

отримані під час тестування, – 99.46%, 97.92% та 95.78% відповідно.

Список використаних джерел

1. Narinyani A.S. Formal Model: general scheme and choosing adequate tools/ Narinyani A.S. — Novosibirsk: CC SD AS USSR, 1978.— 19 p. — (Preprint № 400/CC SD AS USSR). — Bibliography: p. 19.
2. Gladkiy A.V. Syntactic structures of natural language in automated communication systems/ A.V. Gladkiy // Series «Problems of Artificial Intelligence».— Moscow : Science, 1985.— 144 p. — Bibliography.: c. 139.
3. Anisimov A.V. Control space of syntactic structures of natural language / A.V. Anisimov// Cybernetics. — 1990. — №3. — P. 11-17. — Bibliography: c. 17.
4. <http://nlp.stanford.edu/software/lex-parser.shtml>
5. Marie-Catherine de Marneffe and Christopher D. Manning Stanford typed dependencies manual/ http://nlp.stanford.edu/software/dependencies_manual.pdf
6. John Cocke and Jacob T. Schwartz Programming languages and their compilers: Preliminary notes. Technical report, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University. — 1970.
7. T. Kasami An efficient recognition and syntax-analysis algorithm for context-free languages. Scientific report AFCRL-65-758, Air Force Cambridge Research Lab, Bedford, MA. — 1965.
8. Daniel H. Younger Recognition and parsing of context-free languages in time n^3 . Information and Control 10(2): P. 189–208. — 1967.

Надійшла до редколегії 31.07.2013

УДК 519.8

Машченко¹ С.О., д. ф.-м. н., проф.

Мінімакський критерій прийняття рішень при нечіткій множині станів природи

Пропонується метод розв'язання задачі прийняття рішень в умовах невизначеності з нечіткою множиною станів природи, який заснований на принципі гарантованого результату. Побудовано підхід для знаходження кращої за корисністю альтернативи із ступенем належності нечіткій множині розв'язків не менше заданого числа.

Ключові слова: функція належності, нечітка множина, прийняття рішень в умовах невизначеності, раціональний вибір.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т Глушкова 4д,

e-mail: msomail@yandex.ru

Mashchenko¹ S.O., D. Sci (Phys-Math.), Prof.

Minimax criterion of decision making at the fuzzy set of nature states

The method of decision making in the conditions of uncertainty with the fuzzy set nature states is offered, which is based on principle of the assured result. Structural approach for the finding of the best by utility alternative with the membership degree of the not less set number to the fuzzy set of decisions is built.

Keywords: membership function, fuzzy set, decision making in the conditions of uncertainty, rational choice.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,

e-mail: msomail@yandex.ru

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

В загальному випадку задача прийняття рішень (ЗПР) в умовах невизначеності визначається на тріаді множин: X — множина альтернатив; Y — множина наслідків; S — множина станів природи. Альтернативи — це те, що вибирає особа, яка приймає рішення (ОПР). Альтернативами можуть служити об'єкти різної природи, плани, програми, дії і т.п. Наслідки характеризують результат вибору альтернатив. В ЗПР в умовах невизначеності кожній альтернативі може відповідати множина наслідків і тому зв'язок між альтернативами і наслідками може бути неоднозначним. Множина S характеризує прояв невизначеності в прийнятті рішень, причому конкретна інтерпретація станів залежить від постановки задачі (наприклад, попит на ту або іншу продукцію, погода і т.п.).

Оскільки будь-який наслідок ЗПР в нормальній формі [1] однозначно визначається парою $(x, s) \in X \times S$, то ОПР може задати функцію корисності наслідків $u(x, s)$ на множині $X \times S$. Ціль ОПР полягає у виборі такої альтернативи $x \in X$, яка максимізувала б функцію корисності наслідків $u(x, s)$.

Таким чином, виникає задача вибору деякої альтернативи, яка задовольняє умовам

$$u(x, s) \rightarrow \max_{x \in X}, s \in S. \quad (1)$$

Відомо достатньо багато різноманітних підходів до розв'язання ЗПР в нормальній формі [1]. Основна ідея розв'язання задачі (1) полягає в побудові так званого [1] критерію $E(x)$ (функції корисності альтернатив), вигляд якого залежить від наявності деякої додаткової інформації: про стани природи (частіше всього пов'язаної з розподілом ймовірностей на множині S), про особливості ОПР (схильність до ризику і т.п.).

В деяких випадках може бути так, що ОПР не може чітко вказати, які стани природи $s \in S$ актуальні у момент прийняття рішення, але може задати деяку нечітку підмножину $\tilde{S} \subseteq S$ цих станів. Тоді перед ОПР виникає задача вигляду

$$u(x, s) \rightarrow \max_{x \in X}, s \in \tilde{S}, \quad (2)$$

яку називатимемо ЗПР в умовах невизначеності з нечіткою множиною станів природи.

Слід зазначити, що проведені дослідження задачі (2), наприклад в [2], показують, що в загальному випадку її розв'язком є не конкретна альтернатива, а деяка нечітка множина X^* , яка визначена на універсальній множині альтернатив X . Оскільки часто ОПР цікавить будь-яка

конкретна альтернатива, то виникає проблема вибору. Один із загальноприйнятих підходів до розв'язання цієї проблеми полягає у виборі так званої [3] максимізуючої альтернативи $x^* = \arg \max_{x \in X} \mu(x)$, де $\mu(x)$ — функція належності нечіткої множини розв'язків X^* .

Таким чином, вибирається альтернатива з найбільшим ступенем належності нечіткої множини розв'язків X^* . На перший погляд такий вибір представляється логічним, але, з іншого боку, виникає питання про інтерпретацію такої альтернативи x^* . Наприклад, припустимо, що, вважаючи нечітку множину X^* розв'язком задачі (2), ми можемо показати, що такий вибір повністю виключає в деякому певному сенсі ризик для ОПР. Тоді чи ризикуватиме ОПР, вибираючи будь-яку конкретну альтернативу, у тому числі і максимізуючу? Відповідь є простою: "так". Таким чином, в цьому випадку вибір конкретної альтернативи з множини розв'язків, у тому числі максимізуючої, не має першорядного значення. Тому сама альтернатива може виконувати лише допоміжну роль в міру потреб ОПР.

Наведені вище міркування показують, що єдиність вибору в ЗПР в умовах невизначеності з нечіткою множиною станів природи доцільно розуміти в деякому іншому сенсі. Розглянемо наступне поняття.

Лінгвістичною альтернативою задачі (2) назвемо деяку лінгвістичну змінну A [4], яка задається сукупністю $\langle A, X, T_A, G_A, M_A \rangle$, де

- X — універсальна множина альтернатив;
- $T(A)$ — множина її значень (терм-множина),

які є іменами нечітких змінних t ;

- G_A — синтаксична процедура, що дозволяє оперувати елементами терм-множини T_A ;

- M_A — семантична процедура, яка співставляє кожному лінгвістичному значенню T_A в конкретному контексті його сенс $M_A(T_A)$.

У свою чергу кожна нечітка змінна (терм) $t \in T_A$ задається сукупністю $\langle t, X, B_t \rangle$, де нечітка множина B_t визначена на універсальній множині альтернатив X і описує обмеження на значення нечіткої змінної t .

Вважатимемо, що ОПР, вирішуючи задачу (2), вибирає не конкретну альтернативу $x \in X$, а деяку нечітку множину X^* . Ця множина визначає нечітку змінну, яка є відповідним конкретним значенням заданої лінгвістичної альтернативи A .

Для простоти вважатимемо, що для будь-якої нечіткої множини, яку можна визначити на універсальній множині альтернатив X , завжди існує така відповідна йому нечітка змінна, яка або належить терм-множині T_A , або може бути згенерованою синтаксичною процедурою G_A деякої лінгвістичної альтернативи A .

Задачу (2) із заданою лінгвістичною альтернативою A називатимемо лінгвістичною ЗПР в умовах невизначеності з нечіткою множиною станів природи. Очевидно, що для її вирішення достатньо спочатку отримати рішення задачі (2) у вигляді нечіткої множини X^* , а потім за ним визначити значення відповідної нечіткої змінної лінгвістичної альтернативи A .

Таким чином, якщо розв'язок задачі (2) отриманий у вигляді єдиної нечіткої множини X^* , якій відповідає єдина лінгвістична альтернатива, то його можна вважати єдиним розв'язком лінгвістичної ЗПР.

Розглянемо наступний приклад. За яку суму купити автомобіль в кредит строком на 5 років? Альтернативи — витрати x на покупку автомобіля з урахуванням кредиту (в тис. у.о.), $x \in X = [10, 50]$. Стани природи — можливі доходи s за 5 років (в тис. у.о.), $s \in S = [120, 240]$. Наслідки — рівень життя, який оцінюється за шкалою $[0, 100]$ в залежності від різниці $s - x$.

З самої постановки задачі очевидно, що як множина станів природи ймовірно може бути заданою нечітко, так і розв'язок цієї задачі треба шукати у вигляді нечіткої множини, яка буде конкретною нечіткою змінною лінгвістичної альтернативи "вартість авто".

Наприклад, нехай задана лінгвістична альтернатива $\langle A, T(A), X, G_A, M_A \rangle$, де:

- A — "вартість авто";

- $X = [10, 50]$ — універсальна множина альтернатив;

- $T_A = \{\text{"маленька вартість"}, \text{"середня вартість"}, \text{"велика вартість"}\}$ — терм-множина;

- G_A — синтаксична процедура завдання на $X = [10, 50]$ нечітких підмножин A_1 — "маленька вартість", A_2 — "середня вартість", A_3 — "велика вартість" полягає в обчисленні відповідних функцій належності: $\mu_1(x)$, $\mu_2(x)$, $\mu_3(x)$, а також функцій належності нечітких множин для термів з T_A відповідно правилам трансляції нечітких зв'язок і модифікаторів "і", "або", не, "дуже", "злегка", які відповідають

операціям над нечіткими множинами: $A \cap B$, $A \cup B$, $\bar{A}$, $CON(A) = A^2$, $DIL(A) = A^{1/2}$.

- M_A — семантична процедура, яка ставить кожному лінгвістичному значенню його значення, наприклад: $A_1 \cup A_2$ — "маленька або середня вартість", A_1^2 — "дуже маленька вартість" і ін.

Якщо в результаті розв'язання ЗПР в умовах невизначеності з нечіткою множиною станів природи (2) отримана деяка нечітка множина, яка, наприклад, співпадає з $A_1 \cup A_2^{1/2}$, то розв'язком лінгвістичної ЗПР в умовах невизначеності з нечіткою множиною станів природи буде лінгвістична альтернатива "вартість авто", яка має єдине значення "мала або злегка середня вартість".

Оскільки методи визначення значень лінгвістичних змінних представляють самостійний інтерес і достатньо вивчені [4], то ця стаття буде присвяченою розв'язанню ЗПР в умовах невизначеності з нечіткою множиною станів природи в постановці (2).

В цій роботі буде розглядатися нечіткий максимінний критерій прийняття рішень в умовах невизначеності з нечіткою множиною станів природи, в основу якого покладений відомий критерій Вальда [1] (принцип найкращого гарантованого результату). Цей критерій використовує функцію корисності альтернатив $E_V(x) = \min_{s \in S} u(x, s)$, яка відповідає позиції крайньої обережності ОПР. Величина $E_V(x)$ називається гарантованим результатом альтернативи $x \in X$. Шукана альтернатива x^* вибирається з умови

$$E_V(x^*) = \max_{x \in X} E_V(x). \quad (3)$$

Вибрані таким чином альтернативи повністю виключають ризик. Це означає, що які б стани природи $s \in S$ не реалізувалися, відповідний результат не може виявитися гірше, ніж гарантований $E_V(x^*)$. Ця властивість робить критерій Вальда одним з фундаментальних.

Припустимо, ОПР не може чітко задати множину станів природи, які впливатимуть на наслідки прийняття рішень. Нехай $\tilde{S}$ — нечітка множина універсальної множини станів природи S з функцією належності $\mu(s)$, $\mu: S \rightarrow [0, 1]$.

Розглянемо задачу (2). В цьому випадку для кожної фіксованої альтернативи $x \in X$ функція корисності альтернатив приймає вигляд задачі

нечіткого математичного програмування

$$\tilde{E}_V(x) = \min_{s \in \tilde{S}} u(x, s). \quad (4)$$

Задачі нечіткого математичного програмування достатньо вивчені. Згідно [3] передбачається, що для кожної фіксованої альтернативи $x \in X$ ОПР хоче максимізувати функцію $\mu(s)$, $s \in S$, належності нечіткої множини станів природи $\tilde{S}$ і мінімізувати її функцію корисності $u(x, s)$. Розв'язком задачі (4) для фіксованої альтернативи $x \in X$ називається нечітка множина станів природи $S^*(x)$, носієм якої буде множина оптимальних за Парето розв'язків (позначимо її $S^{PO}(x)$) двохкритеріальної задачі оптимізації:

$$\mu(s) \rightarrow \max, u(x, s) \rightarrow \min, s \in S. \quad (5)$$

Нагадаємо, що для задачі (5) множина

$$S^{PO}(x) = \{s^* \in S \mid (\mu(s) < \mu(s^*)) \vee \vee (u(x, s) > u(x, s^*)), \forall s \in S\}. \quad (6)$$

Функцією належності $\pi_x(s)$ нечіткої множини $S^*(x)$ буде звуження функції належності $\mu(s)$, $s \in S$, з універсальної множини S на множину $S^{PO}(x) \subseteq S$. Іншими словами, ця функція належності матиме вигляд

$$\pi_x(s) = \begin{cases} \mu(s), & s \in S^{PO}(x), \\ 0, & s \notin S^{PO}(x). \end{cases} \quad (7)$$

Множині розв'язків задачі (5), якою є нечітка множина $S^*(x)$ з функцією належності $\pi_x(s)$, $s \in S$, згідно [3] відповідає нечітка множина $\tilde{E}_V(x) \subseteq E(x) \subseteq R^1$ оптимальних значень цільової функції цієї задачі з функцією належності $\phi: R^1 \rightarrow [0, 1]$, $\phi_x(y) = \max_{s \in S, u(x, s) = y} \pi_x(s)$, $y \in E(x)$, де $E(x) = \{u = u(x, s) \mid s \in S\} \subseteq R^1$ — універсальна множина можливих корисностей альтернативи $x \in X$ при всіх можливих станах природи.

На основі представлених вище міркувань визначимо поняття нечіткої множини гарантованих наслідків.

Нечіткою множиною гарантованих наслідків для альтернативи $x \in X$ ЗПР в умовах невизначеності з нечіткою множиною станів природи $\tilde{S}$ з функцією належності $\mu(s)$, $s \in S$, називатимемо нечітку множину $\tilde{E}_V(x) \subseteq R^1$ з

функцією належності $\phi_x(y) = \max_{s \in S, u(x,s)=y} \pi(x,s)$.
Значення $y \in E(x)$ називатимемо гарантованим
результатом альтернативи $x \in X$, а
величину $\phi_x(y)$ — її ступенем належності
множині $\tilde{E}_V(x)$.

Визначимо $E \supseteq \bigcup_{x \in X} E(x)$, $E \subseteq R^1$, —
універсальну множину можливих корисностей
альтернатив універсальної множини X при всіх
можливих станах природи. Відзначимо, що для
всієї множини X функція $\phi_x(y)$ визначає
функцію належності $\phi(x,y)$ деякого нечіткого
відображення $\tilde{\Phi}$ з множини альтернатив X у
множину їхніх корисностей $E \subseteq R^1$:

$$\phi(x,y) = \begin{cases} \max_{s \in S, u(x,s)=y} \pi(x,s), & y \in E(x), \\ 0, & y \in E \setminus E(x). \end{cases} \quad (8)$$

Таким чином, виходить, що у разі нечіткої
множини станів природи альтернативи $x \in X$
потрібно порівнювати між собою за
відповідними їм нечіткими множинами $\tilde{E}_V(x)$
значень корисностей. Тому розв'язком задачі
буде нечітка множина, яка забезпечує найкращий
гарантований результат. Для реалізації цієї ідеї
використовуємо техніку, яка розвинута в [3].

Позначимо $\mu_R : E \times E \rightarrow [0,1]$ — функцію
належності чіткого відношення R , яке є
відношенням “ $\geq$ ” - не менше, заданого на
 $E \subseteq R^1$. Очевидно, що

$$\mu_R(z,y) = \begin{cases} 1, & z \geq y, \\ 0, & z < y. \end{cases} \quad (9)$$

Для вирішення поставленої задачі побудуємо
на множині альтернатив X нечітке відношення
переваги, індуковане вихідним відношенням
переваги R і нечіткою ціллю, яка задана
нечітким відображенням $\tilde{\Phi}$. Після цього
виділимо в X нечітку підмножину
недомінованих альтернатив, яка і буде
множиною розв'язків задачі (2).

Довільній альтернативі x^* задане нечітке
відображення $\tilde{\Phi}$ ставить у відповідність нечітку
корисність цієї альтернативи у формі нечіткої
підмножини множини корисностей $E \subseteq R^1$ з
функцією належності $\phi(x^*,y)$.

Нехай $\tilde{\eta}$ — нечітке відношення переваги,
індуковане відношенням переваги R на класі Ψ
всіх нечітких підмножин множини E .

Користуючись цим відношенням, можна
порівнювати між собою нечіткі корисності
альтернатив, а отже, і самі альтернативи. Іншими
словами, ступенем переваги альтернативи
 $x_1 \in X$ альтернативі $x_2 \in X$ будемо вважати
ступінь переваги $\eta(x_1, x_2)$ нечіткої множини
корисностей $\phi(x_1, y)$ нечіткій множині
корисностей $\phi(x_2, y)$.

Таким чином, використовуючи визначення [3]
узагальненого нечіткого відношення переваги,
отримаємо нечітке відношення переваги на
множині альтернатив X наступного вигляду:
 $\eta(x_1, x_2) = \max_{z,y \in E} \min \{ \phi(x_1, z), \phi(x_2, y), \mu_R(z, y) \}$.

Неважко переконатися в тому, що коли
функція належності ϕ задовольняє умові
 $\max_{y \in E} \phi(x, y) = 1, \forall x \in X$, тобто коли множина
корисностей довільної альтернативи утворює
нормальну нечітку множину, то нечітке
відношення переваги η буде рефлексивним,
тобто $\forall x \in X, \eta(x, x) = 1$.

Після того, як і на множині альтернатив
уведене нечітке відношення переваги, вихідна
задача зводиться до ЗПР з ціллю, що задана
нечітким відношенням переваги [3].

Виділимо тепер в множині X найкращий
гарантований результат як нечітку множину
недомінованих (оптимальних за Парето)
альтернатив. Згідно [3] воно матиме наступний
вигляд: $\tilde{\eta}^{PO}(x) = 1 - \max_{x' \in X} \{ \eta(x', x) - \eta(x, x') \} =$

$$= 1 - \max_{x' \in X} \{ \max_{z,y \in E} \min \{ \phi(x', z), \phi(x, y), \mu_R(z, y) \} -$$

$$- \max_{z,y \in E} \min \{ \phi(x, z), \phi(x', y), \mu_R(y, z) \} \}. \text{ За виразом}$$

$$(9) \text{ остаточно отримаємо } \tilde{\eta}^{PO}(x) = 1 - \max_{x' \in X} \{ \max_{\substack{z,y \in E, \\ z \geq y}} \phi(x', z) - \max_{\substack{z,y \in E, \\ z \geq y}} \phi(x, z) \} - \max_{\substack{z,y \in E, \\ z \geq y}} \{ \phi(x, z) - \phi(x', y) \}.$$

Необхідно відзначити, що якщо функція
 $\phi(x, y)$ така, що для деякої альтернативи x^* має
місце нерівність $\sup_{y \in E} \phi(x^*, y) = \alpha < 1$, то значення

$\tilde{\eta}^{PO}(x^*)$ може не відповідати фактичному
ступеню недомінованості цієї альтернативи.

Для того, щоб виключити такі аномальні
випадки, величину $\tilde{\eta}^{PO}(x)$ необхідно
скоректувати. Для цього значення функції
 $\tilde{\eta}^{PO}(x)$ потрібно порівнювати з відповідними
значеннями $\max_{y \in E} \phi(x, y)$.

Спираючись на ці міркування, розв'язком вихідної задачі вважатимемо нечітку множину не з функцією належності $\tilde{\eta}^{PO}$, а з скоректованою функцією $\eta^{PO}(x) = \min\{\tilde{\eta}^{PO}(x), \max_{y \in E} \phi(x, y)\}$.

Неважко показати, що для будь-кого x має місце рівність $\max_{y \in E} \phi(x, y) = \eta(x, x)$. Таким чином, приходимо до наступного поняття.

Нечітку множину X^* з функцією належності $\eta^{PO}(x) = \min\{\tilde{\eta}^{PO}(x), \eta(x, x)\}$ називатимемо розв'язком ЗПР з нечіткою множиною станів природи (2) за нечітким максмінним критерієм.

Якщо раптом ОПР із яких-небудь причин знадобиться максимізує розв'язок x^* , то він може бути знайдений як $\max_{x \in X} \eta^{PO}(x)$.

В деяких випадках ОПР може цікавити краща за корисністю альтернатива із ступенем належності нечіткої множини X^* розв'язків не менше заданого числа $\alpha \in (0, 1]$. В [3] показано, що для її знаходження достатньо вирішити задачу математичного програмування:

$$\begin{aligned} & y \rightarrow \max, \\ & \phi(x, y) \geq \alpha, \\ & x \in X, y \in E \subseteq R^1, \end{aligned} \quad (10)$$

Розв'язання задачі (10) можна істотно спростити, якщо використати наступну теорему.

Теорема. Припустимо, що функція належності нечіткої множини станів природи $\mu(s) > 0, \forall s \in S$. Альтернатива $x^* \in X$ буде кращою за корисністю із ступенем належності множини розв'язків X^* не менше заданого числа $\alpha \in (0, 1]$ за нечітким максмінним критерієм тоді і тільки тоді, коли задовольнятиме системі двох задач математичного програмування:

$$u(x^*, s^*) = \max_{x \in X} \min_{s \in S, \mu(s) \geq \alpha} u(x, s), \quad (11)$$

$$\mu(s^*) = \max\{\mu(s) \mid u(x^*, s) \leq u(x^*, s^*)\}, s \in S. \quad (12)$$

Доведення. Нехай $x^* \in X$ і $s^* \in S$ задовольняють (11) (12). Покажемо, що x^* і $y^* = u(x^*, s^*)$ задовольняють (10). Дійсно, з (11), (12) випливає, що

$$u(x^*, s) \geq u(x^*, s^*) \geq u(x, s^*), \quad \forall x \in X, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} & \forall s \in \{s \in S \mid \mu(s) \geq \alpha\} \\ & \mu(s^*) \geq \alpha \end{aligned} \quad (14)$$

$$\mu(s^*) \geq \mu(s), \forall s \in \{s \in S \mid u(x^*, s) \leq u(x^*, s^*)\}. \quad (15)$$

Покажемо, що $s^* \in S^{PO}(x^*)$. Припустимо супротивне $s^* \notin S^{PO}(x^*)$. Тоді згідно (6) $\exists s \in S$, для якого виконуються нерівності:

$$\text{або } u(x^*, s) < u(x^*, s^*) \quad (16)$$

$$\text{або } \mu(s) > \mu(s^*) \quad u(x^*, s) \leq u(x^*, s^*). \quad (17)$$

Якщо мають місце нерівності (16), то отримаємо суперечність з (13), (14). Якщо ж мають місце нерівності (17), то отримаємо суперечність з (15). Таким чином, $s^* \in S^{PO}(x^*)$.

Припустимо супротивне, що x^* і $y^* = u(x^*, s^*)$ не задовольняють (10). Можливі наступні випадки.

1. Припустимо, що $\phi(x^*, y^*) < \alpha$. Тоді $\max_{s \in S, u(x^*, s) = y^*} \pi(x^*, s) < \alpha$. Звідси $\pi(x^*, s) < \alpha$ для $\forall s \in S$, таких що $u(x^*, s) = y^*$. У тому числі і для s^* . Тому $\pi(x^*, s^*) < \alpha$. Оскільки $s^* \in S^{PO}$, то $\pi(x^*, s^*) = \mu(s^*)$. Звідси $\mu(s^*) < \alpha$, що суперечить (14).

2. Припустимо, що $\exists \bar{y} > y^*$ і $x \in X$, що $\phi(x, \bar{y}) \geq \alpha, \bar{y} \in E(x) = \{y = u(x, s) \mid s \in S\}$. Це означає, що $\exists \bar{s} \in S$ і $x \in X$, для яких виконуються нерівності

$$\phi(x, u(x, \bar{s})) \geq \alpha, \quad (18)$$

$$u(x, \bar{s}) > u(x^*, s^*). \quad (19)$$

З (18) випливає, що $\phi(x, u(x, \bar{s})) = \max_{s \in S, u(x, s) = u(x, \bar{s})} \pi(x, s) \geq \alpha$. Звідси $\exists \tilde{s} \in S$, для якого $\pi(x, \tilde{s}) \geq \alpha$ і $u(x, \tilde{s}) = u(x, \bar{s})$. Тоді з (19) випливає нерівність $u(x, \tilde{s}) > u(x^*, s^*)$. Тому $\tilde{s} \notin S^{PO}(x^*)$. Тоді $\pi(x, \tilde{s}) = 0$ і ми одержуємо суперечність $0 \geq \alpha > 0$. Достатність умови теореми доведена.

Покажемо необхідність. Нехай y^* задовольняє (10). Звідси випливають нерівності: $y^* \geq y, \forall y \in Y = \{y \in R^1 \mid \phi(x, y) \geq \alpha, y \in E(x), x \in X\}$.

Оскільки на підставі (8) $\phi(x, y) = \max_{s \in S, u(x, s) = y} \pi(x, s)$, то ці нерівності можна переписати у вигляді

$$y^* \geq y, \forall y \in Y = \{y \in R^1 \mid \max_{s \in S, u(x, s) = y} \pi(x, s) \geq \alpha, y \in E(x), x \in X\}. \quad (20)$$

Позначимо $x^* \in X$ таку альтернативу, що $y^* = u(x^*, s^*)$, де стан природи $s^* = \arg \max_{s \in S, u(x^*, s) = y^*} \pi(x^*, s)$. Відзначимо, що оскільки за припущенням задача (10) має розв'язок, то і (20) має розв'язок. Тому x^*, s^* існують. Тоді

$$\pi(x^*, s^*) \geq \alpha \quad (21)$$

і (20) можна переписати у вигляді $u(x^*, s^*) \geq u(x, s) \quad \forall x \in X \quad \forall u(x, s) \in \{u(x, s) \in E(x) \mid \max_{v \in S, u(x, v) = u(x, s)} \pi(x, v) \geq \alpha\}$.

Ці нерівності, у свою чергу, можна записати таким чином:

$$u(x^*, s^*) \geq u(x, s), \forall x \in X, \forall s \in S(x) = \{s \in S \mid \max_{v \in S, u(x, v) = u(x, s)} \pi(x, v) \geq \alpha\}. \quad (22)$$

З (22), зокрема, випливає, що для $s = s^*$

$$u(x^*, s^*) \geq u(x, s^*) \quad \forall x \in X. \quad (23)$$

Також з (22), зокрема, випливає, що для фіксованого $x = x^*$

$$u(x^*, s^*) \geq u(x^*, s), \forall s \in S(x^*) = \{s \in S \mid \max_{v \in S, u(x^*, v) = u(x^*, s)} \pi(x^*, v) \geq \alpha\}. \quad (24)$$

Оскільки за визначенням задачі (10) $\alpha > 0$, то з (24) очевидно випливає, що $\pi(x^*, \bar{s}) > 0$ для $\forall \bar{s} \in S(x^*)$. Тому через припущення теореми про те, що $\mu(s) > 0, \quad \forall s \in S$, враховуючи (7), отримуємо

$$\mu(\bar{s}) = \pi(x^*, \bar{s}) \geq \alpha, \quad (25)$$

$$\bar{s} \in S^{PO}(x^*) \quad (26)$$

для $\forall \bar{s} \in S(x^*)$. Таким чином, з (25) і (24) випливають нерівності

$$u(x^*, s^*) \geq u(x^*, s), \forall s \in S(x^*) = \{s \in S \mid \mu(s) \geq \alpha\}. \quad (27)$$

Відзначимо також, що з (21) і (24) випливає включення

$$s^* \in S(x^*). \quad (28)$$

Тому з (25), (26), (28) випливає відповідно

$$\mu(s^*) \geq \alpha, \quad (29)$$

$$s^* \in S^{PO}(x^*). \quad (30)$$

Покажемо, що пара x^*, s^* задовольняє (13) – (15). Припустимо супротивне, що умови (13) – (15) не виконуються. Тоді можливі випадки.

1. Припустимо, що $\exists x \in X \quad u(x^*, s^*) < u(x, s^*)$. Тоді отримаємо суперечність з (23).

2. Припустимо, що $\exists \bar{s} \in S$, для якого $\mu(\bar{s}) \geq \alpha$ і $u(x^*, s^*) < u(x^*, \bar{s})$. В цьому випадку отримаємо суперечність з (27).

3. Нехай $\mu(s^*) < \alpha$. Тоді отримаємо суперечність з (29).

4. Припустимо, що $\exists \bar{s} \in S$, для якого виконуються нерівності $\mu(s^*) < \mu(\bar{s})$ і $u(x^*, \bar{s}) \leq u(x^*, s^*)$. В цьому випадку згідно (6) отримаємо суперечність з (30).

Таким чином, пара x^*, s^* задовольняє (13) – (15) і задачі (10) і (11), (12) мають одні і ті ж розв'язки. Теорему доведено.

На закінчення відзначимо, що розглянутий вище метод розв'язку ЗІР в умовах невизначеності з нечіткою множиною станів природи можна легко узагальнити на випадок нечіткої множини альтернатив і нечітких оцінок корисності наслідків. Для цього достатньо використати відому техніку [3] дефазифікації.

List of used sources

1. Truhaev R.I. Decision making models in conditions of uncertainty / R.I. Truhaev. – М.: Nauka, 1981. – 258 p. (in Russian).
2. Mashchenko S.O. Generalization Germeyer's criterion in the decision making problem in conditions of uncertainty with the fuzzy set of nature states / S.O. Mashchenko // Journal of Automation and Information Sciences. – 2012. – № 5. – P. 102 – 110 (in Russian).
3. Orlovskiy S.A. Problems of decision making at fuzzy initial information / S.A. Orlovskiy. – М.: Science, 1981. – 208 p. (in Russian).
4. Zadeh L.A. The concept of a linguistic variable and its application to approximate reasoning – 1 / L.A. Zadeh // Inform. Sci. – 1975. – 8. – P. 199 – 249.

Надійшла до редколегії 22.10.13.

УДК 517.9

О.А. Покутний, к. ф.-м.н., наук.сп.

Узагальнено - обернений оператор в просторах Фреше, Банаха та Гільберта

В роботі запропоновано означення сильного узагальнено - оберненого та узагальненого - псевдооберненого оператора в просторах Банаха та Гільберта відповідно. Завдяки процесові поповнення вдається відмовитися від умови замкненості його множини значень та довести, що будь-який лінійний обмежений оператор в просторі Гільберта має узагальнений псевдообернений.

Ключові слова: псевдообернений за Муром-Пенроузом оператор, узагальнений розв'язок, розшарування.

01601, вул.Терещенківська 3, Інститут математики НАН України

E-mail: lenasas@gmail.com

Статтю представив Кудін В.І., д.т.н., с.н.с.

Вступ. Добре відомо [1, 2], що для будь-якої прямокутної матриці розміру $m \times n$ існує псевдообернена за Муром-Пенроузом. Цей факт є корисним ще й тому, що гарантує існування розв'язку задачі за методом найменших квадратів. На жаль такого результату для лінійних відображень в нескінченновимірних, зокрема, в просторах Гільберта, отримати не вдається за рахунок наявності більш складної геометрії. В даній замітці запропоновано означення деякого узагальненого псевдооберненого та сильного узагальнено-оберненого операторів, що є аналогами відомих понять псевдооберненого за Муром-Пенроузом та узагальнено-оберненого операторів [3].

Узагальнений псевдообернений оператор в просторах Гільберта. Нехай $L : H_1 \rightarrow H_2$ – лінійний обмежений оператор, що діє з простору Гільберта H_1 в простір Гільберта H_2 . Відомо [3], що такий оператор має псевдообернений тоді й тільки тоді, коли

O.O. Pokutnyi, PhD, res. as.

Generalized inverse operator in Frechet, Banach and Hilbert spaces

The definitions of strongly generalized inverse and generalized pseudoinverse operators in the Banach and Hilbert spaces are proposed. Using recruiting process for some norm we can omit the condition of closure of its set of values and prove that any bounded linear operator in Hilbert space has generalized pseudoinverse.

Key Words: Moore-Penrose pseudoinverse operator, generalized solution, bundle.

01601, 3 Tereshenkivska str., Institute of mathematics of NAS of Ukraine

він нормально-розв'язний (тобто має замкнену множину значень). Покажемо яким чином можна розширити це поняття на довільні лінійні обмежені оператори. Для зняття умови замкненості помітимо, що мають місце наступні розклади просторів в ортогональні суми

$$H_1 = N(L) \oplus X, H_2 = \overline{R(L)} \oplus Y.$$

Тут $X = N(L)^\perp$, $Y = \overline{R(L)}^\perp$. В силу представлення існують оператори ортогонального проектування $\mathcal{P}_{N(L)}$, $\mathcal{P}_X$ та $\mathcal{P}_{\overline{R(L)}}$, $\mathcal{P}_Y$ на відповідні підпростори. Позначатимемо через H фактор простір простору H_1 за ядром $N(L)$ ($H = H_1/N(L)$). Тоді, як відомо [7], існує неперервна бієкція $p : X \rightarrow H$ та проекція $j : H_1 \rightarrow H$. Трійка (H_1, H, j) є локально тривіальним розшаруванням з типовим шаром $\mathcal{P}_{N(L)}H_1$. Визначимо тепер оператор

$$\mathcal{L} = \mathcal{P}_{\overline{R(L)}}Lj^{-1}p : X \rightarrow R(L) \subset \overline{R(L)}.$$

Легко переконатися в тому, що визначений таким чином оператор є лінійним, ін'єктивним та неперервним. Тепер скориставшись процесом поповнення [8] за нормою $\|x\|_{\bar{X}} = \|\mathcal{L}x\|_F$, де $F = \overline{R(L)}$, отримаємо новий простір $\bar{X}$ й розширений оператор $\bar{\mathcal{L}}$. Тоді цей оператор

$$\bar{\mathcal{L}} : \bar{X} \rightarrow \overline{R(L)}, \quad X \subset \bar{X}$$

буде здійснювати гомеоморфізм між $\bar{X}$ та $\overline{R(L)}$. Розглянемо розширений оператор $\bar{L} = \bar{\mathcal{L}}\mathcal{P}_{\bar{X}} : \bar{H}_1 \rightarrow H_2$,

$$\bar{H}_1 = N(L) \oplus \bar{X}, H_2 = R(\bar{L}) \oplus Y$$

Зрозуміло, що $\bar{L}x = Lx, x \in H_1$ та оператор $\bar{L}$ є нормально розв'язним.

Означення 1. Оператор $\bar{L}^+ : H_2 \rightarrow \bar{H}_1$ будемо називати узагальненим псевдооберненим до оператора L .

Зуваження 1. З даного означення одразу випливає, що узагальнений псевдообернений до оператора L є псевдооберненим до оператора $\bar{L}$.

Сильний узагальнено-обернений в просторах Фреше та Банаха. Нагадаємо, що в тому випадку, коли вихідні простори H_1 та H_2 є векторними просторами, поняття про узагальнено-обернений оператор було введено ще в роботі [9].

Відзначимо одразу, що геометрія простору Банаха ускладнює структуру доповнювальності підпросторів й виконується далеко не завжди на відміну від лінійних векторних просторів [4]. І тому питання про визначення узагальнено-оберненого в якомусь певному сенсі залишається відкритим. За рахунок процесу поповнення, про який йшлося в попередній частині, це поняття можна поширити на випадок локально-опуклих просторів та просторів Банаха з необов'язково замкнутою множиною значень.

Перейдемо до відповідних конструкцій. Нехай задано лінійний обмежений оператор L , що діє з простору Банаха (Фреше або локально-опуклого) B_1 у простір Банаха B_2 . Надалі будемо вважати, що для цих просторів мають місце

наступні розклади в прямі суми підпросторів

$$B_1 = N(L) \oplus X, B_2 = \overline{R(L)} \oplus Y \quad (1)$$

(тобто простори $N(L)$ та $\overline{R(L)}$ доповнювальні), й відповідні розклади одиниці

$$I_{B_1} = P_{N(L)} + P_X, I_{B_2} = P_{\overline{R(L)}} + P_Y,$$

де $P_{(\cdot)}$ - проектори на відповідні підпростори.

За аналогією до означень, введених в [9] для векторних просторів, введемо означення узагальненої L допустимої пари.

Означення 2. Нехай $L : B_1 \rightarrow B_2$ лінійний обмежений оператор, що діє з простору Банаха B_1 у простір Банаха B_2 , а підпростори $X \subset B_1$ та $Y \subset B_2$ такі, що виконується умова (1). Тоді відповідну пару (X, Y) будемо називати узагальненою L -допустимою парою.

Розглянемо тепер звужений оператор $L_X x = Lx, x \in X, L_X : X \rightarrow \overline{R(L)}$ (він буде лінійним, неперервним та ін'єктивним). Поповнимо простір X за новою нормою $\|x\| = \|L_X x\|_{B_2}$ (якщо розглядувані простори є просторами Фреше або локально-опуклими, то поповнювати слід за зліченною системою напівнорм, або в загальному випадку за системою напівнорм, що визначають топологію простору [8]) і розширимо оператор L_X на поповнений простір $\bar{X}$ за неперервністю (розширений оператор будемо позначати $\bar{L}_X$). Тоді, як відомо, оператор $\bar{L}_X : \bar{X} \rightarrow \overline{R(L)}$ буде здійснювати гомеоморфізм між просторами $\bar{X}$ та $\overline{R(L)}$. Будемо позначати через $\bar{B}_1 = \bar{X} \oplus N(L)$ - розширений вихідний простір.

Означення 3. Нехай $L \in \mathcal{L}(B_1, B_2)$ та (X, Y) - узагальнена L -допустима пара. Тоді відображення

$$L_{X,Y}^- : B_2 \rightarrow \bar{B}_1,$$

$L_{X,Y}^- u = \bar{L}_X^{-1} u_1, u = u_1 + u_2, u_1 \in \overline{R(L)}, u_2 \in Y$, називатимемо сильним (X, Y) -узагальнено оберненим до L .

Зуваження 2. Якщо вихідні простори є просторами Гільберта, то узагальнений

псевдообернений оператор $\bar{L}^+$ до оператора L з означення 2 буде також сильним (X, Y) -узагальнено-оберненим до L в сенсі означення 6. Таким чином, в просторах Гільберта довільний лінійний обмежений оператор має сильний $(N(L)^\perp, \overline{R(L)}^\perp)$ -узагальнено обернений.

Лінійні рівняння з обмеженим оператором. Поняття узагальнених розв'язків та їх представлення. Розглянемо в просторах Банаха B_1 та B_2 лінійне рівняння

$$Lx = y, \quad (2)$$

де y -фіксований елемент простору B_2 , L - такий лінійний обмежений оператор, що пара (X, Y) є узагальненою L -допустимою. Зрозуміло, що в загальному випадку розв'язок такого рівняння може існувати не для всіх правих частин і може бути не єдиним. Коли розв'язку не існує в звичайному сенсі, то часто відшукують такий елемент $\bar{x} \in B_1$ який мінімізує норму нев'язки $\|Lx - y\|_{B_2}$. Його називають псевдо- або квазірозв'язком в залежності від просторів в яких воно розглядається [3, 10]. Для існування такого розв'язку умова замкненості множини значень оператора L є суттєвою й в загальному випадку така варіаційна задача може не мати розв'язку.

В цій частині робиться спроба дати такі означення розв'язків для рівняння (2), щоб можна було гарантувати їх існування при будь-яких правих частинах.

Ми розширимо вихідний простір B_1 й оператор L на нього таким чином (використавши побудовану вище конструкцію), щоб варіаційна задача на розширеному просторі мала розв'язки в певному сенсі завжди. Відображення яке буде встановлювати відповідність між розв'язками та правими частинами в загальному випадку виявляється багатозначним.

Означення узагальнених розв'язків та основний результат. Основні результати сформулюємо в просторах Банаха та Гільберта. В такий ситуації для рівняння (2) ми будемо виділяти такі три типи розв'язків.

1) Класичні розв'язки.

Розглянемо випадок, коли оператор L нормально-розв'язний. Тоді, як відомо елемент

$y \in R(L)$ тоді й тільки тоді, коли $\mathcal{P}_{N(L^*)}y = 0$. В цьому випадку існує узагальнено-обернений (псевдообернений за Муром-Пенроузом у просторі Гільберта) оператор L^- (L^+) і множина розв'язків (2) може бути представлена у вигляді

$$x = L^-y + \mathcal{P}_{N(L)}c, \forall c \in B_1$$

(у випадку простору Гільберта елемент L^+y серед усіх розв'язків має найменшу норму).

2) Сильні узагальнені розв'язки.

Розглянемо випадок, коли множина значень оператора L не є замкнутою. Оскільки оператор L має (X, Y) -узагальнену L -допустиму пару, то для просторів B_1 та B_2 справедливий розклад (1).

Тоді ми можемо вести мову про сильний узагальнений розв'язок рівняння (2). Оскільки оператор $\bar{L}_X$ здійснює гомеоморфізм між просторами $\bar{X}$ та $\bar{R}(L)$, то коректним буде наступне означення.

Означення 4. Елемент $\bar{L}_X^{-1}y$ будемо називати сильним узагальненим розв'язком рівняння (2), якщо $y \in \bar{R}(L)$.

Тоді множина всіх сильних узагальнених розв'язків рівняння (2) буде мати вигляд

$$x = \bar{L}_{X,Y}y + \mathcal{P}_{N(L)}c, \forall c \in B_1.$$

3) Узагальнені квазірозв'язки.

Розглянемо випадок, коли $y \notin \bar{R}(L)$. Для елемента y це рівносильно виконанню умови $\mathcal{P}_{N(L^*)}y \neq 0$. В цьому випадку сильних узагальнених розв'язків не існує, але існують такі елементи з $\bar{X}$, що є розв'язками варіаційної задачі $\inf \|\bar{L}x - y\|_{B_2}$, де $\bar{L} = \bar{L}_{\bar{X}}\mathcal{P}_{\bar{X}}$ та інфімум береться по всім елементам $x \in \bar{X}$. Ці елементи і будемо називати узагальненими квазірозв'язками.

Означення 5. Довільний елемент з множини $\{\bar{L}_{X,Y}y + \mathcal{P}_{N(L)}c\}_{c \in B_1}$ будемо називати узагальненим квазірозв'язком рівняння (2).

Зауваження 3. Зазначимо, що якщо $R(L) = \bar{R}(L)$, то узагальнені квазірозв'язки співпадають зі звичайними квазірозв'язками.

Зауваження 4. Оператор $L_{X,Y}^-$ з означення 6 визначається не єдиним чином на відміну від оператора $\bar{L}^+$.

Теорема 1. Нехай для оператора L існує (X, Y) узагальнена L - допустима пара. Тоді рівняння (2) є завжди розв'язним.

а) 1. Існують сильні узагальнені розв'язки рівняння (2) тоді й тільки тоді, коли елемент $y \in B_2$ задовольняє умову

$$\mathcal{P}_{N(L^*)}y = 0; \quad (3)$$

якщо $y \in R(L)$, то отримані розв'язки будуть класичними;

2. Якщо умова (3) виконується, то множина сильних узагальнених розв'язків рівняння (2) буде мати вигляд

$$x = L_{X,Y}^-y + \mathcal{P}_{N(L)}c, \forall c \in B_1;$$

б) 1. Існують узагальнені квазірозв'язки рівняння (2) тоді й тільки тоді, коли елемент $y \in B_2$ задовольняє умову

$$\mathcal{P}_{N(L^*)}y \neq 0; \quad (4)$$

2. Якщо умова (4) виконується, то множина узагальнених квазірозв'язків буде мати вигляд

$$x = L_{X,Y}^-y + \mathcal{P}_{N(L)}c, \forall c \in B_1.$$

Зауваження 5. Якщо оператор L має вигляд $L = I - A$, де $\|A^n\| \leq c, n \in \mathbb{N}, c = \text{const} > 0$, то основні твердження можуть бути уточнені. А саме: в роботі [11] показано, що в цьому випадку розв'язки рівняння (2) можна знаходити у вигляді узагальненого ряду Неймана.

Автор вдячний професору Семенову В.В. за ряд цінних зауважень й цікавість до роботи.

Список використаних джерел

1. Moore E.H. On the Reciprocal of the General Algebraic Matrix (Abstract) // Bull. Amer. Math. Soc. - 1920. - vol.26. - 394–395 p.
2. Penrose R.A. Generalized Inverse for Matrices // Proc. Cambridge Philos. Soc., 1955, vol. 51. - 406–413 p.
3. Boichuk A.A., Samoilenko A.M. Generalized Inverse Operators and Fredholm Boundary-Value Problems. – VSP, Utrecht–Boston, 2004. – 317 p.
4. Gohberg I.C., Krupnik N.Ya. Introduction to the one-dimensional theory of singular integral operators. – Kishinev: Stiinca, 1973. - 426 p. (in Russian)
5. Korolyuk V.S., Turbin A.F. Mathematical foundations of complex phase of consolidation systems. – K: Naukova dumka, 1978. – 218 p. (in Russian)
6. Trenogin V.A. Functional analysis. - M.: Nauka, 1980. - 495 p. (in Russian)
7. Antonevich A.B. Bundle spaces and K-theory: first steps. Spectral and evolution problems, 2010, p.14 - 51. (in Russian)
8. Klyushin D.A., Lyashko S.I., Nomirovskii D.A., Petunin Yu. I., Semenov V.V. Generalized Solutions of Operator Equations and Extreme Elements. – Springer, 2012. – 202+xxi p.
9. Deutch E. Semi-inverses, reflexive semi-inverses, and pseudoinverses of an arbitrary linear transformation // Linear algebra and its applications, 1971, v.4. - p.313 - 322.
10. Tihonov A.N., Arsenin V.Ya. Methods for solving ill-posed problems. - M.: Nauka, 1979. - 285p. (in Russian)
11. Pokutnyi A.A. Development of the Neimann's series method of generalized invertibility on the spectrum of an operator in Banach and Frechet spaces // Reports of the NAS of Ukraine, 2013, No.1. - 19 - 23.

Надійшла до редколегії 25.03.2013

УДК 004.424

Прусов В.А.¹, д. ф.-м. н., проф.,
Дорошенко А.Ю.², д. ф.-м. н., проф.,
Кацалова Л.М.³, к. ф.-м. н.,
Бекетов О.Г.⁴, аспірант

Паралельні обчислення двовимірної задачі конвективної дифузії на відеокарті

Оснoву сучасних метеорологічних моделей складають нелінійні тривимірні рівняння конвективної дифузії. Задача реалізації цих рівнянь є обчислювально складною. Застосування паралельних обчислень при розв'язанні таких задач є поширеною практикою.

В даній роботі пропонується застосування розпаралелювання на відеографічних процесорах при реалізації метеорологічних моделей. Представлено результати розв'язання тестової задачі за допомогою технології CUDA та графічного прискорювача. Проведено аналіз отриманих результатів.

Ключові слова: метеорологія, конвективна дифузія, паралельні обчислення, графічний прискорювач

^{1,3} Український науково-дослідний гідрометеорологічний інститут, 03028, м. Київ, просп. Науки, 37

^{2,4} Інститут програмних систем НАНУ, 03680, Київ-187, просп. Академіка Глушкова, 40

E-mails: ¹ vitaliy.prusov@gmail.com, ² dor@isofts.kiev.ua, ³ lessiagook@bigmir.net,

⁴ beketov.oleksii@gmail.com

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

Вступ

В сучасній науці екологічні, кліматичні та синоптичні прогнози тісно пов'язані з математичним моделюванням циркуляції атмосфери. Рівняння Нав'є-Стокса та тепло-, масо переносу, що складають основу сучасних моделей циркуляції [1], є нелінійними тривимірними рівняннями конвективної дифузії. Як правило, модель складають більше десятка таких рівнянь. Саме тому задача реалізації моделі циркуляції атмосфери має значну обчислювальну складність, а також, обмеження на строк отримання розв'язку. На сьогодні, в розвинених

V.A.Prusov¹, D.Sci(Phys-Math.), Prof.,
A.Y.Doroshenko², D.Sci(Phys-Math.), Prof.,
V.M.Katsalova³, Ph.D. (Phys-Math.),
O.G.Beketov⁴, Postgrad. Stud.

Parallel computing of two-dimensional convective diffusion problem using graphics processing unit

The basis of modern meteorological models are nonlinear three-dimensional convection diffusion equations. The problem of realization of these equations is computationally complex. Usage of parallel computing for solving such problems is a common practice.

In this paper the application of parallelization with graphics processors for meteorological models implementation is proposed. The results of solving the test problem using CUDA technology with graphics processing unit are presented. An analysis of the obtained results provided.

Key words: meteorology, convective diffusion, parallel computing, graphics processing unit

^{1,3} Ukrainian Hydrometeorological Institute, 03028, Kyiv, 37 Nauky Av.

^{2,4} Institute of Software Systems NAS Ukraine, 03680, Kyiv-187, 40 Glushkova Av.

країнах розв'язання таких задач проводиться із застосуванням паралельного програмування та використанням багатопроцесорних суперкомп'ютерів. Проте ще досі, для України, можливість використання дорогої високопродуктивної обчислювальної техніки залишається проблемою.

Альтернативною платформою для проведення паралельних обчислень є відеографічні процесори, що вирізняються порівняною дешевизною, компактністю та економічністю. Цей новий напрямок комп'ютерних обчислень є надзвичайно актуальним для вітчизняної науки.

В даній роботі приведено приклад застосування технології паралельних обчислень на відеографічних процесорах при розв'язанні двовимірної задачі конвективної дифузії з метою показати ефективність такого підходу при реалізації моделей циркуляції атмосфери.

Огляд GPGPU-технології CUDA

Специфіка роботи графічного прискорювача полягає у тому, що він має одночасно обробляти велику кількість пікселів візуалізуючого пристрою. Тому архітектура графічного прискорювача побудована таким чином, щоб уможливити одночасне виконання операцій з певним набором даних (SIMT-архітектура). В результаті розвитку GPU технологій з'явилося нове спрямування в обчислювальній техніці - GPGPU (*General Purpose computing on Graphics Processing Units*) – використання графічних процесорів для обчислювальних задач.

В 2006 році розробник графічних прискорювачів NVIDIA презентував GPGPU технологію CUDA (*Compute Unified Device Architecture*), що дозволяє проводити обчислення використовуючи графічні прискорювачі. Маючи виробничу продуктивність порядку сотень гігафлопс, графічні прискорювачі надають змогу проводити об'ємні обчислення навіть на звичайному ПК.

CUDA – програмно-апаратна архітектура, що дозволяє проводити обчислення за допомогою графічних процесорів NVIDIA. Графічний прискорювач (GPU) розглядається як спеціальний пристрій, що є масивно-паралельним сопроцесором центрального пристрою (CPU), має власну пам'ять та здатен одночасно виконувати велику кількість підпрограм – тредів. При виконанні програма на CUDA використовує як центральний пристрій, так і графічний. Типова схема виконання програми наступна:

1. Виділення області пам'яті на GPU та копіювання даних з CPU у виділену область пам'яті GPU.
2. Запуск ядра – паралельної частини програми, що виконується на GPU. Запуск виконує та керує ним CPU.
3. Копіювання отриманих результатів з пам'яті GPU до CPU та очищення виділеної пам'яті.

Основний процес CUDA виконується на головному пристрої. CPU-код ініціалізує GPU, розподіляє пам'ять відеокарти та системну пам'ять, копіює вихідні дані в пам'ять відеокарти,

здійснює запуск ядер, копіює отримані результати з відеопам'яті, звільняє пам'ять і завершує роботу.

Апаратно графічні прискорювачі NVIDIA, що підтримують технологію CUDA, складаються з набору CUDA-ядер, кожне з яких здатне одночасно виконувати певну кількість тредів. Усі треди підпорядковуються наступній ієрархії. Верхній рівень ієрархії – сітка – підпорядковує усі треди, що виконують ядро. Сітка являє собою одно- або двовимірний масив блоків. Кожен блок – це одновимірний або двовимірний масив тредів, причому всі блоки, що утворюють сітку, мають однакові розмірність та розмір. Звертання до окремих тредів відбувається за допомогою індексів: кожен блок у сітці має адресу (індекс блоку у сітці), аналогічно кожен тред у блоці має свій власний індекс всередині блоку; таким чином, кожний тред має унікальний ідентифікатор. Треди можуть взаємодіяти між собою лише всередині одного блоку; під взаємодією розуміється використання окремої для кожного блоку так званої спільної пам'яті, а також синхронізація тредів, що може бути здійснена між тредями окремого блоку, проте не може бути здійснена на всьому GPU. Програма GPU (ядро) виконується над сіткою блоків потоків.

Таким чином, розділяючи основну задачу на сукупність підзадач, що можуть виконуватись незалежно одна від одної, і розв'язуючи ці підзадачі, використовуючи одночасно виконувані треди, досягається паралелізм виконання алгоритму.

Розв'язання графічних задач не потребує високої точності обчислень, тому звичайні відеокарти до останнього часу не підтримували 64-розрядний тип змінних з плаваючою крапкою. Проте спеціально розроблені відеокарти для розрахункових задач підтримують низку додаткових можливостей, таких як подвоєна точність, тривимірні сітки, глобальна синхронізація. Використовуючи їх можливості можна ефективно розв'язувати обчислювально громіздкі математичні задачі, до яких відноситься реалізація прогностичних метеорологічних моделей.

Чисельний експеримент

Рівняння Нав'є-Стокса та тепло-, масо переносу, що складають основу сучасних метеорологічних моделей, є нелінійними тривимірними рівняннями конвективної дифузії:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \Lambda u = f, \quad (x_1, x_2, x_3) \in \Omega/\Gamma, \quad t > 0, \quad (1)$$

$$u(0, x_1, x_2, x_3) = u^0(x_1, x_2, x_3), \quad (x_1, x_2, x_3) \in \Omega, \quad (2)$$

$$u(t, x_1, x_2, x_3) = 0, \quad (x_1, x_2, x_3) \in \Gamma, \quad t > 0, \quad (3)$$

де $\Omega = [0, \ell_1] \times [0, \ell_2] \times [0, \ell_3]$ – просторова область визначення задачі, Γ – границя області Ω , $u = u(t, x_1, x_2, x_3)$ – залежна функція, $f = f(t, x_1, x_2, x_3)$ – вільний член рівняння,

$$\Lambda = \sum_{\alpha=1}^3 \Lambda_{\alpha} \quad - \quad \text{просторовий диференціальний}$$

оператор, що подається через суму простіших операторів:

$$\Lambda_{\alpha} = v_{\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(\mu_{\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right),$$

$$v_{\alpha} = v_{\alpha}(x_1, x_2, x_3), \quad \mu_{\alpha} = \mu_{\alpha}(x_1, x_2, x_3) > 0.$$

Для проведення чисельного експерименту було розглянуто частковий випадок задачі (1)-(3) з відомим розв'язком:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + v_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial u}{\partial x_2} = \\ = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\mu_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\mu_2 \frac{\partial u}{\partial x_2} \right) + f \end{aligned} \quad (4)$$

при $(x_1, x_2) \in [0; 1]^2$, $t \in [0; 10]$,

$$u(0, x_1, x_2) = \sin(x_1 + x_2) \quad (5)$$

при $(x_1, x_2) \in [0; 1]^2$, $t = 0$,

$$u(t, x_1, x_2) = u_A(t, x_1, x_2) \quad (6)$$

при $(x_1, x_2) \in \partial[0; 1]^2$, $t \in [0; 10]$,

де

$$v_k = \sin(x_k), \quad \mu^{(k)} = 0.001 + 0.1 * \sin^2(x_k) > 0,$$

$$f(t, x_1, x_2) =$$

$$= (v_1 + v_2 - (1 + 0.1 * (\sin(2x_1) + \sin(2x_2)))) \times \\ \times \cos(x_1 + x_2 - t) + (\mu_1 + \mu_2) * \sin(x_1 + x_2 - t).$$

Аналітичний розв'язок задачі (4)-(6) має вигляд

$$u_A(t, x_1, x_2) = \sin(x_1 + x_2 - t). \quad (7)$$

Розв'язання задачі (4)-(6) проводилось за допомогою адитивно-усередненого методу розщеплення [2] та методу явного рахунку [3]. Застосовано алгоритм тривірневого паралелізму (модифікований адитивно-усереднений метод (МАУМ)), представлений в [4]. Було розроблено реалізацію наведеного підходу для архітектури відеографічного прискорювача [5] засобами CUDA та OpenMP.

Створена реалізація МАУМ використовує рівномірну декомпозицію області Ω сіткою з

кроком h розбиття часового проміжку з кроком τ . Розв'язок отримується в кожній точці сітки, і порівнюється із точним розв'язком в кінцевий момент часу.

У табл. 1 наведено часові витрати на виконання двох програм, що використовують метод МАУМ, розроблених для різних обчислювальних платформ - багатопроцесорної системи зі спільною пам'яттю (OpenMP API) та графічного прискорювача (CUDA API). Розрахунки проводились із використанням графічного прискорювача NVIDIA GeForce GTX 650 Ti (768 CUDA-ядер, базова частота 928MHz, об'єм глобальної пам'яті 1024Mb) та процесора Intel Core i5-3570 (4 ядра, базова частота 3.40GHz, 64-бітний набір інструкцій) у 64-бітному форматі представлення чисел з плаваючою крапкою.

Таблиця 1.

Час розв'язання задачі (4)-(6) з використанням CPU та GPU за допомогою МАУМ при різних значеннях просторового та часового кроків (h - просторовий крок, τ - крок за часом, T_{CPU} та T_{GPU} - час розв'язання задачі на CPU та GPU платформах відповідно, $err_{\max}$ - найбільше відхилення від точного розв'язку в точках сітки, $acc = T_{CPU} / T_{GPU}$ - відносне прискорення).

$1/h$	τ	T_{CPU}	T_{GPU}	$err_{\max}$	acc
128	h	1,37	1,52	0,0072	0,90
256	$h/2$	25,81	14,26	0,0048	1,81
512	$h/4$	683,63	176,44	0,0027	3,87
1024	$h/8$	10966	2687,32	0,0015	4,08

Для оптимального навантаження GPU параметр розбиття області $1/h$ обирався кратним 128. Із поданої таблиці видно, що порівняно невелике збільшення точності потребує суттєвого збільшення витрат часу на проведення обчислень.

При збільшенні кількості задіяних при розв'язанні повністю розпаралелюваної задачі процесорів удвічі, час, витрачений на розв'язання задачі, не може скоротитися більш, ніж у два рази. На практиці через витрати часу на передачу даних коефіцієнт прискорення при подвоєнні кількості процесорів ніколи не досягає двох. Як видно із таблиці, щоб досягти результатів продуктивності, які показує досліджувана відеокарта при значенні переметрів $1/h = 256$ та $\tau = h/2$, знадобилося б два процесори. Щоб

наблизитися до результатів прискорювача при $1/h=1024$ та $\tau=h/8$, необхідно задіяти не менше чотирьох процесорів. З огляду на співвідношення вартості графічного прискорювача та відеокарти, використання останньої є економічно вигідним для розв'язання розглянутого типу задач.

На наступному графіку зображена залежність часу виконання від розміру просторової сітки зі сталим часовим кроком для GPU та одного ядра CPU.

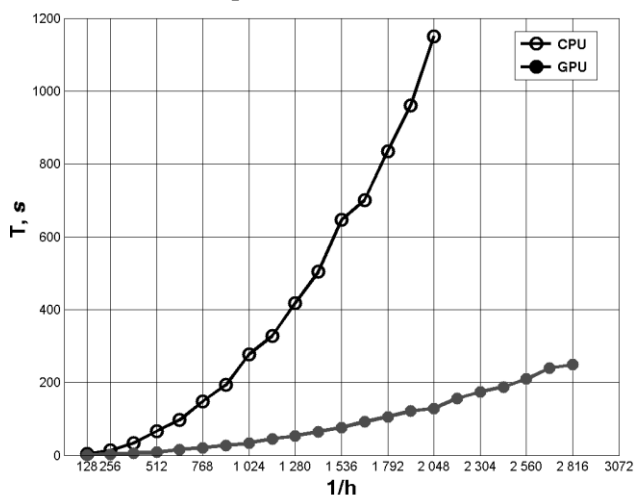


Рисунок 1. Час розв'язання задачі (4)-(6) з використанням GPU та одного ядра CPU в залежності від розміру розбиття області при фіксованому $\tau=0.01$.

Як ілюструє отриманий графік, при подрібненні області час, витрачений на обчислення відеокартою, зростає повільніше, ніж час, витрачений процесором. Графічний прискорювач, хоча й володіє меншою тактовою частотою, в силу особливостей своєї архітектури порадиться із задачами, які потребують великої кількості однотипних операцій (що властиво для задач на сітках) краще, ніж процесорне ядро, яке може виконувати операції лише з послідовним потоком даних.

Недоліком відеографічного прискорювача є обмежена оперативна пам'ять. У сучасних користувацьких відеокарт її об'єм не перевищує 4Gb, на відміну від оперативної пам'яті центрального пристрою, об'єм якої може бути значно більшим. Проте таке обмеження не поширюється на GPU, спеціалізованих саме на високопродуктивних обчисленнях.

Висновки

В даній роботі запропоновано використовувати відеографічні процесори при

розв'язанні складних задач чисельного прогнозу, як альтернативу багатопроекторним машинам.

Для обґрунтування доцільності такого підходу було розв'язано тестову задачу (4)-(6) із застосуванням паралельних обчислень на графічних прискорювачах. Розроблено реалізацію алгоритму розв'язку тестової задачі для архітектури відеографічного прискорювача засобами CUDA.

Представлено результати чисельного експерименту й проведено їх аналіз.

Згідно отриманих даних можна зробити висновок, що запропонований підхід ефективний при розв'язанні тестової задачі. Застосування розпаралелювання на відеокарті дає відчутне зменшення часу розв'язання задачі, дозволяє зменшувати часові й просторові кроки, тим самим покращувати точність розв'язку.

Так як алгоритм розпаралелювання для тестової задачі аналогічний алгоритму розв'язку складних рівнянь, що складають прогностичні метеорологічні моделі, можна стверджувати, що запропонований підхід ефективний для реалізації останніх. Тобто, паралельні обчислення на відеографічних процесорах й засоби CUDA доцільно застосовувати при реалізації математичних моделей циркуляції атмосфери.

Список використаних джерел

1. V.A.Prusov, A.Y.Doroshenko. Modelling of natural and anthropogenic processes in the atmosphere. – Kyiv: Naukova Dumka, 2006. – 542 p. (in ukr.)
2. Gordeziani D.G., Meladze G.V. Simulation of the third boundary value problem for multidimensional parabolic equations in an arbitrary domain by one-dimensional equations. – Zn vychisl. Mat. Mat. Fiz. – 1974. - №1. – P. 246- 250 (in rus.)
3. Prusov V.A., Doroshenko A.Y. Chernish R.I., Huk L.M. Efficient difference scheme numerical solution of the convective diffusion problem. – Cybernetics and Systems Analysis. - 2007. - №3. - P. 64 – 74 (in rus.).
4. Chernysh R.I. Modified additive-averaged splitting algorithm, its parallel realization and application to meteorological problems. – Manuscript. Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, 2010 (in ukr.)
5. NVIDIA. NVIDIA CUDA C Programming Guide 4.1, November 2011.

Надійшла до редколегії 08.07.2013

УДК 517.925.41

Роман В. Рузич, аспірант

«Генетичні» особливості біогеоценозів

У роботі розглядається модель розімкненого гіперциклу Ейгена як засіб опису еволюції біогеоценозів. Побудовано матрицю Якобі системи. На основі аналізу останньої показано, що при збільшенні складності системи поведінка асоціацій зберігається. Також відображено дестабілізаційний ефект зникнення однієї з асоціацій.

Ключові слова: екосистема, стійкість, гіперцикл, якісний аналіз.

Хмельницький національний університет,
29000, м. Хмельницький, вул. Інститутська, 7
e-mail: ninasus@gmail.com

Roman V. Ruzich, Postgraduate Student

«Genetic» features of biogeocenoses

We consider model of open Eigen's hypercycle for modeling of biogeocenoses' evolution. The Jacobi matrix was built. It was determined that behavior of associations is saved at complexification of the system. The destabilizing effect of disappearance of one association was shown.

Key Words: ecosystem, stability, hypercycle, qualitative analysis.

Khmelnytsky National University, 29000,
Khmelnytsky, Instytutska street, 7
e-mail: ninasus@gmail.com

Статтю представив д.т.н., проф. Кудін В.І.

Вступ

На сучасному етапі розвитку суспільства та науки побудова та аналіз математичних моделей є одним з найпотужніших засобів отримання знань про навколишнє середовище. Переваги математичного моделювання (зокрема перед експериментом) визначає його широке застосування в ході досліджень в різних галузях науки, в тому числі і в екології. Відмітимо, що завдяки використанню методологічної бази моделювання було отримано досить багато важливих результатів при дослідженні екологічних систем як на популяційному [5, 12], так і на макро (біосферному) рівні [1, 10, 17].

В роботі зосередимо увагу на розгляді довготривалих процесів, що відбуваються в екологічних системах і відображають здатність останніх до гомеостазу та саморозвитку. Така динаміка характерна філоценогенезу [9], як одному з видів сукцесій [3, 6]. Дослідження філоценогенезу є ключем до розуміння розвитку та укладення структури екосистем і виникнення біологічної різноманітності на Землі.

Традиційно для опису сукцесійних процесів використовуються стохастичні моделі, зокрема марківського типу [7, 11, 15]. Основним параметром, що визначає динаміку екологічних процесів, у таких моделях є ймовірність переходу між станами системи. Недоліком цих моделей є

те, що вони не відображають сукцесійні механізми.

Одним з таких механізмів є конкуренція, що підкреслюється багатьма дослідниками [4, 14]. Прогнозовано використовувати для опису подібної взаємодій між елементами екосистеми моделі вольтерівського типу [8, 16]. Проте в цих моделях можлива ситуація, коли асоціації не конкурують і кожна з них досягає оптимальної чисельності. Також є необхідність відображення зв'язку між біотичними та абіотичними елементами. Ці недоліки виправлені в моделі розімкненого гіперциклу Ейгена, запропонованій С. В. Чернишенком [2]. Зазначена модель поки що мало досліджена: проаналізовано лише двовимірний [2, 18] та тривимірний [13, 19, 20] випадок моделі.

Постановка задачі.

В роботі розглядатимемо довготривалі сукцесійні процеси для опису, яких використовується модель розімкненого гіперциклу Ейгена:

$$\dot{x}_i = \left(F_i(x) - \frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^n x_j F_j(x) \right) x_i, \quad i = \overline{1, n}, \quad (1)$$

де $F_i(x) = a_{i-1}x_{i-1} - x_i$, $i = \overline{1, n}$; $a_i > 0$, $i = \overline{1, n-1}$; $x_0 = 1$, $a_0 = N$, $N > 0$, $S_0 > 0$. Тут x_i – популяційна змінна, чисельність (концентрація або біомаса) i -ої асоціації, $i = \overline{1, n}$; N – коефіцієнт, що визначає чисельність першої асоціації в стані рівноваги при відсутності другої; a_i – коефіцієнт, що відображає залежність $(i+1)$ -ої асоціації від i -ої, $i = \overline{1, n-1}$; S_0 – ємність середовища (розмір екологічної ніші).

В цій статті розглянемо певні “генетичні” властивості біогеоценозів та властивості їх еволюції. Під “генетичними” розумітимемо деякі елементи спадковості в розвитку екосистем.

Якобін системи

Представимо поліноми у правій частині системи (1) як $y_i = a_{i-1}x_{i-1}x_i - x_i^2 - \frac{x_i}{S_0} \sum_{j=1}^n (a_{j-1}x_{j-1}x_j - x_j^2)$, $i = \overline{1, n}$. Тоді їх похідну по змінній x_k визначимо таким чином:

$$y_i^{<k>} = a_{i-1}x_{i-1}^{<k>}x_i + a_{i-1}x_{i-1}x_i^{<k>} - 2x_i^{<k>} - \frac{x_i^{<k>}}{S_0} \sum_{j=1}^n (a_{j-1}x_{j-1}x_j - x_j^2) - \frac{x_i}{S_0} \sum_{j=1}^n (a_{j-1}x_{j-1}x_j - x_j^2)^{<k>}, i, k = \overline{1, n},$$

де $<k>$ означає похідну першого порядку по x_k .

Проаналізувавши співвідношення індексів i та k , можемо виділити такі випадки:

$$y_i^{<k>} = -\frac{x_i}{S_0} (a_{k-1}x_{k-1} - 2x_k + a_kx_{k+1}),$$

$$i, k = \overline{1, n}, i \neq k, i-1 \neq k, k \neq n, \quad (2)$$

$$y_i^{<k>} = -\frac{x_i}{S_0} (a_{k-1}x_{k-1} - 2x_k),$$

$$i = \overline{1, n-2}, k = n, \quad (3)$$

$$y_i^{<k>} = a_{i-1}x_{i-1} - 2x_i - \frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^n (a_{j-1}x_{j-1}x_j - x_j^2) - \frac{x_i}{S_0} (a_{i-1}x_{i-1} - 2x_i + a_ix_{i+1}), i = \overline{1, n-1}, i = k, \quad (4)$$

$$y_i^{<k>} = a_{i-1}x_{i-1} - 2x_i - \frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^n (a_{j-1}x_{j-1}x_j - x_j^2) - \frac{x_i}{S_0} (a_{i-1}x_{i-1} - 2x_i), i = k = n, \quad (5)$$

$$y_i^{<k>} = a_{i-1}x_i - \frac{x_i}{S_0} (a_{i-2}x_{i-2} - 2x_{i-1} + a_{i-1}x_i),$$

$$i = \overline{2, n}, i-1 = k. \quad (6)$$

Спираючись на отримані формули (2)-(6), запишемо структуру рядків матриці Якобі системи (1):

$$\begin{matrix} (2) & (6) & (4) \text{ або } (5) & (2) \text{ або } (3) \\ m & l & 1 & d \end{matrix}$$

де $m = \varphi(i-2)$, $l = \begin{cases} 1, i > 1, \\ 0, i = 1, \end{cases}$ $d = n - m - l - 1$,

$$\varphi(x) = \begin{cases} x, x \geq 0, \\ 0, x < 0, \end{cases} \quad i - \text{номер рядка, } i = \overline{1, n}.$$

Розглянемо випадок, коли деяка координата x_p особливої точки дорівнює нулю. Тоді рядок p матриці Якобі можемо записати як

$$\begin{matrix} 0 & a_{p-1}x_{p-1} - \frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^n (a_{j-1}x_{j-1}x_j - x_j^2) & 0 \\ p-1 & 1 & n-p \end{matrix}$$

Розглянемо характеристичне рівняння цієї матриці Якобі (позначимо її як J) у матричній формі:

$$|J - \lambda I| = 0,$$

де I – одинична матриця, λ – власні значення.

Розкладемо визначник на алгебраїчні доповнення по описаному вище рядку p

$$\left(\lambda - a_{p-1}x_{p-1} + \frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^n (a_{j-1}x_{j-1}x_j - x_j^2) \right) A_p = 0,$$

де A_p – мінор по діагональному елементу, який згадується у рядку p визначника.

Теорема 1. Якщо координата x_p особливої точки дорівнює нулю, то одне з власних значень матриці Якобі у цій точці обчислюється як

$$a_{p-1}x_{p-1} - \frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^n (a_{j-1}x_{j-1}x_j - x_j^2) \quad (7)$$

при умові, що x_p – перша координата або попередня перед x_p координата не нульова, та як

$$-\frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^n (a_{j-1} x_{j-1} x_j - x_j^2) \quad (8)$$

у іншому випадку.

«Спадковість» в ході філоценогенезу

У роботі [20] було показано, що пару власних значень матриці Якобі в деяких особливих точках тривимірної моделі розімкненого гіперциклу Ейгена можна визначити з аналізу двовимірної моделі. Такі точки було названо «нащадками». Ще однією особливістю цих точок є те, що їх перші координати відповідають особливій точці двовимірної моделі, а остання координата – нуль. Узагальнимо дане спостереження на багатовимірний випадок.

Теорема 2. $n-1$ власне значення матриці Якобі в точка «нащадках» n -вимірної моделі розімкненого гіперциклу Ейгена визначається як власні значення матриці Якобі у відповідних точках $(n-1)$ -вимірної системи, а ще одне власне значення дорівнює $a_{n-1} x_{n-1} - \frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^{n-1} (a_{j-1} x_{j-1} x_j - x_j^2)$.

Доведення. Нехай остання координата особливої точки дорівнює нулю, тоді останній рядок матриці Якобі у ній запишеться як

$$\underbrace{0 \dots 0}_{n-1} \quad a_{n-1} x_{n-1} - \frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^{n-1} (a_{j-1} x_{j-1} x_j - x_j^2).$$

Клітина, що включає перші $n-2$ рядки та $n-2$ стовпці, згідно з формулами (2), (4), (6) не відрізняється від загального випадку, причому елементи головної діагоналі можна записати як

$$y_i^{<k>} = a_{i-1} x_{i-1} - 2x_i - \frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^{n-2} (a_{j-1} x_{j-1} x_j - x_j^2) - \frac{x_i}{S_0} (a_{i-1} x_{i-1} - 2x_i + a_i x_{i+1}), \quad i = \overline{1, n-2}, \quad i = k.$$

Елементи $(n-1)$ -го рядка клітини, що складається з перших $n-1$ рядків та $n-1$ стовпці отриманої матриці Якобі, визначаються як

$$y_{n-1}^{<k>} = -\frac{x_{n-1}}{S_0} (a_{k-1} x_{k-1} - 2x_k + a_k x_{k+1}), \quad k = \overline{1, n-3};$$

$$y_{n-1}^{<n-2>} = a_{n-2} x_{n-1} - \frac{x_{n-1}}{S_0} (a_{n-3} x_{n-3} - 2x_{n-2} + a_{n-2} x_{n-1});$$

$$y_{n-1}^{<n-1>} = a_{n-2} x_{i-2} - 2x_{n-1} - \frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^{n-1} (a_{j-1} x_{j-1} x_j - x_j^2) - \frac{x_{n-1}}{S_0} (a_{n-2} x_{n-2} - 2x_{n-1});$$

а елементи останнього стовпця цієї клітини як

$$y_i^{<n-1>} = -\frac{x_i}{S_0} (a_{n-2} x_{n-2} - 2x_{n-1}), \quad i = \overline{1, n-2}.$$

Звідси описана клітина розміру $(n-1) \times (n-1)$ є матрицею Якобі $(n-1)$ -вимірної моделі розімкненого гіперциклу Ейгена у точці, утвореній відкиданням останньої координати (яка є нулем) особливої точки n -вимірної моделі. Таким чином, $n-1$ власне значення матриці Якобі в точка «нащадках» n -вимірної моделі визначається як власні значення матриці Якобі у відповідних точках $(n-1)$ -вимірної системи, а ще одне власне значення згідно з теоремою 1 за формулою (8). Що й потрібно було довести.

Наслідок 2.1. Нехай особлива точка A n -вимірної моделі розімкненого гіперциклу Ейгена є точкою «нащадком» $(n-k)$ -вимірної моделі. Вказану $(n-k)$ -вимірну модель назовемо базовою. Тоді $n-k$ власних значень матриці Якобі в точці A визначається з базової системи, $(k-1)$ за формулою (9), а одне дорівнює

$$a_{n-k} x_{n-k} - \frac{1}{S_0} \sum_{j=1}^{n-k} (a_{j-1} x_{j-1} x_j - x_j^2). \quad (9)$$

Стійкість особливих точок

Розглянемо деякі особливі точки системи (1) з не більше ніж двома ненульовими координатами. Позначимо через Z множину цілих чисел. З системи

$$\begin{cases} \left(N - x_1 - \frac{1}{S_0} ((N - x_1) x_1 - x_1^2) \right) x_1 = 0, \\ \left(-x_i - \frac{1}{S_0} ((N - x_1) x_1 - x_i^2) \right) x_i = 0, \\ x_i \neq 0, \quad i \in [2, n], \quad i \in Z, \end{cases}$$

легко показати, що серед особливих точок є множина таких:

$$M_1 = \left\{ \left(\frac{N+S_0}{2}, 0 \dots 0, \frac{S_0-N}{2}, 0 \dots 0 \right) \middle| i \in [3, n], i \in \mathbb{Z} \right\}$$

$$M_2 = \left\{ \left(0 \dots 0, S_0, 0 \dots 0 \right) \middle| i \in [2, n], i \in \mathbb{Z} \right\}.$$

Система

$$\begin{cases} \left(-x_j + \frac{1}{S_0}(x_j^2 + x_i^2) \right) x_j = 0, \\ \left(-x_i + \frac{1}{S_0}(x_j^2 + x_i^2) \right) x_i = 0, \\ x_j \neq 0, x_i \neq 0, |i-j| > 1, i, j \in [2, n], i, j \in \mathbb{Z}, \end{cases}$$

визначає наступну множину особливих точок:

$$M_3 = \left\{ \left(0 \dots 0, \frac{S_0}{2}, 0 \dots 0, \frac{S_0}{2}, 0 \dots 0 \right) \middle| i, j \in [2, n], \right.$$

$$\left. |i-j| > 1, i, j \in \mathbb{Z} \right\}.$$

З системи

$$\begin{cases} \left(-x_i - \frac{1}{S_0}((a_i x_i - x_{i+1})x_{i+1} - x_i^2) \right) x_i = 0, \\ \left(a_i x_i - x_{i+1} - \frac{1}{S_0}((a_i x_i - x_{i+1})x_{i+1} - x_i^2) \right) x_i = 0, \\ x_i \neq 0, x_{i+1} \neq 0, i \in [2, n-1], i \in \mathbb{Z}, \end{cases}$$

можна визначити таку множину особливих значень:

$$M_4 = \left\{ \left(0, \dots, 0, \frac{S_0}{a_i+2}, \frac{S_0(a_i+1)}{a_i+2}, 0, \dots, 0 \right) \middle| i \in [2, n-1], \right.$$

$$\left. i \in \mathbb{Z} \right\}.$$

Використовуючи формули (2)-(6) та (7), (8), легко можна визначити власні значення матриці Якобі у визначених вище особливих точках. Так, в точках з множини M_1 власні значення такі:

$$\lambda_1 = \frac{S_0 - N + Na_1 + S_0 a_1}{2}, \lambda_2 = (a_i + 1) \frac{S_0 - N}{2},$$

$$\lambda_3 = \frac{N^2 - S_0^2}{2S_0}, \lambda_j = \frac{S_0 - N}{2}, j = \overline{4, n},$$

в точках з множини M_2 : $\lambda_1 = N + S_0$,

$$\lambda_2 = S_0(1 + a_i), \lambda_j = S_0, j = \overline{3, n}, (a_n = 0),$$

в точках з множини M_3 : $\lambda_1 = N + \frac{S_0}{2}$,

$$\lambda_2 = -\frac{S_0}{2}, \lambda_3 = \frac{S_0}{2}(a_i + 1), \lambda_4 = \frac{S_0}{2}(a_j + 1),$$

$$\lambda_k = -\frac{S_0}{2}, k = \overline{5, n};$$

в точках з множини M_4 : $\lambda_1 = N + \frac{S_0}{a_i + 2}$,

$$\lambda_2 = \frac{S_0(1 + a_{i+1} + a_i a_{i+1})}{a_i + 2}, \lambda_3 = -\frac{S_0(a_i + 1)}{a_i + 2},$$

$$\lambda_j = \frac{S_0}{a_i + 2}, j = \overline{4, n}.$$

Ще розглянемо деякі особливі точки системи (1) з не більше ніж трьома ненульовими координатами. З системи

$$\begin{cases} \left(N - x_1 - \frac{1}{S_0}((N - x_1)x_1 + (a_1 x_i - x_{i+1})x_{i+1} - \right. \\ \left. - x_i^2) \right) x_1 = 0, \\ \left(-x_i - \frac{1}{S_0}((N - x_1)x_1 + (a_1 x_i - x_{i+1})x_{i+1} - x_i^2) \right) \times \\ \times x_i = 0, \\ \left(a_i x_i - x_{i+1} - \frac{1}{S_0}((N - x_1)x_1 + (a_1 x_i - x_{i+1})x_{i+1} - \right. \\ \left. - x_i^2) \right) x_i = 0, \\ x_i \neq 0, x_{i+1} \neq 0, i \in [3, n-1], i \in \mathbb{Z}, \end{cases}$$

можна показати, що серед множини особливих точок системи (1) є така підмножина:

$$M_5 = \left\{ \left(\frac{N(a_i + 2) + S_0}{a_i + 3}, 0, \dots, 0, \frac{S_0 - N}{a_i + 3}, \right. \right.$$

$$\left\{ \left(\frac{S_0 - N(a_i + 1)}{a_i + 2}, 0, \dots, 0 \right) \middle| i \in [3, n-1], i \in \mathbb{Z} \right\}.$$

Серед розв'язків системи

$$\begin{cases} \left(N - x_1 - \frac{1}{S_0}((N - x_1)x_1 - x_i^2 - x_j^2) \right) x_1 = 0, \\ \left(-x_j - \frac{1}{S_0}((N - x_1)x_1 - x_i^2 - x_j^2) \right) x_j = 0, \\ \left(-x_i - \frac{1}{S_0}((N - x_1)x_1 - x_i^2 - x_j^2) \right) x_i = 0, \\ x_j \neq 0, x_i \neq 0, |i - j| > 1, i, j \in [3, n], i, j \in \mathbb{Z}, \end{cases}$$

є така множина

$$M_6 = \left\{ \left(\frac{2N + S_0}{3}, 0, \dots, 0, \frac{S_0 - N}{3}, 0, \dots, 0, \frac{S_0 - N}{3}, 0, \dots, 0 \right) \middle| i, j \in [3, n], |i - j| > 1, i, j \in \mathbb{Z} \right\}.$$

Система

$$\begin{cases} \left(N - x_1 - \frac{1}{S_0}((N - x_1)x_1 + (a_1x_1 - x_2)x_2 - x_i^2) \right) x_1 = 0, \\ \left(a_1x_1 - x_2 - \frac{1}{S_0}((N - x_1)x_1 + (a_1x_1 - x_2)x_2 - x_i^2) \right) x_2 = 0, \\ \left(-x_i - \frac{1}{S_0}((N - x_1)x_1 + (a_1x_1 - x_2)x_2 - x_i^2) \right) \times \\ \times x_i = 0, \\ x_i \neq 0, i \in [4, n], i \in \mathbb{Z}, \end{cases}$$

визначає таку множину особливих точок:

$$M_7 = \left\{ \left(\frac{2N + S_0}{3}, \frac{S_0(a_1 + 1) + N(a_1 - 1)}{a_1 + 3}, 0, \dots, 0, \right. \right.$$

$$\left. \left(\frac{S_0 - N(a_1 + 1)}{a_1 + 3}, 0, \dots, 0 \right) \middle| i \in [4, n], i \in \mathbb{Z} \right\}.$$

Розв'язком системи рівнянь

$$\begin{cases} \left(-x_j + \frac{1}{S_0}(x_j^2 + x_i^2 + x_k^2) \right) x_j = 0, \\ \left(-x_i + \frac{1}{S_0}(x_j^2 + x_i^2 + x_k^2) \right) x_i = 0, \\ \left(-x_k + \frac{1}{S_0}(x_j^2 + x_i^2 + x_k^2) \right) x_k = 0, \\ x_j \neq 0, x_i \neq 0, x_k \neq 0, |i - j| > 1, |i - k| > 1, \\ |k - j| > 1, i, j, k \in [2, n], i, j, k \in \mathbb{Z}, \end{cases}$$

є наступна множина

$$M_8 = \left\{ \left(0, \dots, 0, \frac{S_0}{3}, 0, \dots, 0, \frac{S_0}{3}, 0, \dots, 0, \frac{S_0}{3}, 0, \dots, 0 \right) \middle| |i - j| > 1, \right. \\ \left. |i - k| > 1, |k - j| > 1, i, j, k \in [2, n], i, j, k \in \mathbb{Z} \right\}.$$

3 системи

$$\begin{cases} \left(-x_k - \frac{1}{S_0}((a_i x_i - x_{i+1})x_{i+1} - x_i^2 - x_k^2) \right) x_1 = 0, \\ \left(-x_i - \frac{1}{S_0}((a_i x_i - x_{i+1})x_{i+1} - x_i^2 - x_k^2) \right) x_i = 0, \\ \left(a_i x_i - x_{i+1} - \frac{1}{S_0}((a_i x_i - x_{i+1})x_{i+1} - x_i^2 - x_k^2) \right) \times \\ \times x_i = 0, \\ x_i \neq 0, x_k \neq 0, x_{i+1} \neq 0, i \in [3, n-1], k \in [2, n], \\ k \neq i-1, k \neq i+1, k \neq i+2, i, k \in \mathbb{Z}, \end{cases}$$

знаходиться така множина особливих точок

$$M_9 = \left\{ \left(0, \dots, 0, \frac{S_0}{a_i + 3}, 0, \dots, 0, \frac{S_0}{a_i + 3}, \frac{S_0(a_i + 1)}{a_i + 3}, 0, \dots, 0 \right) \middle| \right. \\ \left. i \in [3, n-1], k \in [2, n], |k - i| \neq 1, k \neq i+2, i, k \in \mathbb{Z} \right\}.$$

Розв'язком системи

$$\left\{ \begin{aligned} &\left(-x_i - \frac{1}{S_0} ((a_1 x_i - x_{i+1}) x_{i+1} + \right. \\ &\quad \left. + (a_{i+1} x_{i+1} - x_{i+2}) x_{i+2} - x_i^2) \right) x_i = 0, \\ &\left(a_i x_i - x_{i+1} - \frac{1}{S_0} ((a_1 x_i - x_{i+1}) x_{i+1} + \right. \\ &\quad \left. + (a_{i+1} x_{i+1} - x_{i+2}) x_{i+2} - x_i^2) \right) x_i = 0, \\ &\left(a_{i+1} x_{i+1} - x_{i+2} - \frac{1}{S_0} ((a_1 x_i - x_{i+1}) x_{i+1} + \right. \\ &\quad \left. + (a_{i+1} x_{i+1} - x_{i+2}) x_{i+2} - x_i^2) \right) x_1 = 0, \\ &x_i \neq 0, x_{i+1} \neq 0, x_{i+2} \neq 0, i \in [3, n-2], i \in \mathbb{Z}, \end{aligned} \right.$$

є множина особливих точок

$$M_{10} = \left\{ \left(0, \dots, 0, \frac{S_0}{a_i + a_{i+1} + a_i a_{i+1} + 3}, \right. \right. \\ \left. \left. \frac{S_0(a_i + 1)}{a_i + a_{i+1} + a_i a_{i+1} + 3}, \frac{S_0(a_{i+1} + a_i a_{i+1} + 1)}{a_i + a_{i+1} + a_i a_{i+1} + 3}, 0, \dots, 0 \right) \right. \\ \left. i \in [3, n-2], i \in \mathbb{Z} \right\}.$$

Згідно з теоремою 1 серед власних значень матриці Якобі в точках з множини M_{10} є такі

$$\frac{S_0}{a_i + a_{i+1} + a_i a_{i+1} + 3} + N; \text{ в точках з множини } M_9 \\ - \frac{S_0}{a_i + 3} + N; \text{ в точках з множини } M_8 - \frac{S_0 + 3N}{3}.$$

Враховуючи теорему 2 та результати дослідження власних значень чотиривимірної моделі, виконаного в статті [6], можемо стверджувати, що серед власних значень матриці Якобі в точках з множин M_5 , M_7 існує принаймні одне додатне. Використовуючи формулу (7) легко показати, що серед власних значень матриці Якобі в точках з множини M_6 є такі: $\frac{S_0 - N}{3}$ та $\frac{N - S_0}{3}$.

З проведеного дослідження бачимо, що всі точки множин $M_1 - M_{10}$ є нестійкими. Отже, ми

показали для певної підмножини множини особливих точок системи (1), що якщо справа від нульової координати особливої точки існує ненульова координата, то така точка нестійка при будь-яких додатних значеннях параметрів. З екологічної точки зору дане спостереження досить важливе. Згідно з отриманими результатами, якщо в екосистемі існує деяка асоціація, то існують також і асоціації-попередники. Таким чином, з розвитком біогеоценозу збільшується біорізноманіття. Повне ж знищення однієї з асоціацій призводить до дестабілізації екосистеми, що у свою чергу може призвести і до деградації останньої.

Висновок

В роботі розглянуто багатовимірну модель розімкненого гіперциклу Ейгена у застосуванні до опису філоценогенезу. Побудовано матрицю Якобі цієї системи. На основі аналізу останньої було показано, що біогеоценози володіють "генетичними" властивостями. Вказані властивості появляються в тому, що частину власних значень матриці в Якобі в деяких особливих точках можна визначити з дослідження моделей меншої вимірності. З екологічної точки зору це означає, що поведінка асоціацій зберігається при збільшенні складових системи. Таким чином, екосистема більшої складності на ранніх етапах свого розвитку характеризується такою ж динамікою асоціацій як і система меншої складності.

Також в роботі на прикладі певної множини особливих точок показано, що якщо справа від нульової координати особливої точки існує ненульова координата, то така точка нестійка при будь-яких додатних значеннях параметрів. Виконаний у цій статті аналіз та дослідження тривимірного та чотиривимірного випадку моделі розімкненого гіперциклу Ейгена [6] дозволяє нам сподіватись, що зазначене спостереження вірне. Проте його доведення залишається відкритим питанням. Відмітимо, що зазначене спостереження досить важливе, оскільки відображає механізм збільшення біологічної різноманітності екосистеми та дестабілізаційний вплив зникнення навіть однієї асоціації.

У даній роботі описано певні закономірності еволюції екосистеми, але не визначено її хід. Вирішення цього питання планується у майбутньому.

Список використаних джерел

1. *Alekseev V.V., Kryshev I.I., Sazykina T.G.* Physical and mathematical modeling of ecosystems. – St. Petersburg: Gidrometeoizdat, 1992. – 368 p. (in Russian).
2. *Chernyshenko S.V.* Nonlinear dynamics of forest ecosystems methods. – Dnepropetrovsk: Publishing House of the DNU, 2005. – 500 p. (in Russian).
3. *Clements F.E.* Plant succession: Analysis of the development of vegetation. – Washington D.C.: Publ. Carnegi Inst., 1916. – 242 p. (in English).
4. *Kogan A.B., Naumov N.P., Rezhabek B.G., Chorayan O.G.* Biological Cybernetics. – Moscow: Vysshaya shkola, 1977 – 408 p. (in Russian).
5. *Svirezhev Yu.M., Logofet D.O.* Stability of biological communities. – Moscow: Nauka, 1978. – 352 p. (in Russian).
6. *Sukachev V. N.* Fundamentals of forest typology and biogeocenology. Selected works: in three volumes. V.1. – Leningrad: "Science". Leningrad Branch, 1972 – 420 p. (in Russian).
7. *Brannan R.B., Brannan R.B., Reneke J.A., Waide J.* A diffusion model of forest succession // Mathematical biosciences. – 1984. – № 69. – P. 131-149. (in English).
8. *Chakrabarti C.G., Sutapa Ghosh, Syamali Bhadra* Non-equilibrium thermodynamics of Lotka-Volterra ecosystems: Stability and evolution // Journal of Biological Physics. – 1995. – Vol. 21, Is. 4. – P. 273-284. (in English).
9. *Chernyshenko S.V., Chernyshenko V.S., Alekseyev M.O.* Nonlinear theory of successions in forestry biogeocoenoses: mathematical aspects // Ecology and Noospherology. – 2011. – Vol. 22, № 1-2. – P. 134-146. (in English).
10. *Komarov A.S., Zubkov E.V.* Dynamics of distribution of ecological niches in forest plant communities in succession // Math. Biology and Bioinform. – 2012. – Vol. 7, № 1. – P. 152-161. (in Russian).
11. *Logofet D. O.* Markovian chains as succession models: new prospects of classical paradigm // Lesovedenye. – 2010. – № 2. – P. 46-59. (in Russian).
12. *Matsenko V. G.* The existence and unity in two species system with age-structure // Nauk. Visn. Chernivtsi University. Math. – 2007. – Is. 336-337. – P. 112-116. (in Ukrainian).
13. *Ruzich R. V.* Stability of Stationary Points of Three-dimension Case of One Model of Ecological Macrosystem // Visn. Odessa Nath. Univ. Math. and Mech. – 2012. – Vol. 17, Is. 3 (15). – P. 45-51. (in Ukrainian).
14. *Tilman D.* Constrains and Tradeoffs: Toward a Predictive Theory of Competition and Succession // Oikos. – 1990. – Vol. 58, № 1. – P. 3-15. (in English).
15. *Usher M. B.* Markovian approaches to ecological succession // J. Anim. Ecology. – 1979. – Vol. 48. – P. 413-426. (in English).
16. *Weis J. J., Cardinale B. J., Forshay K. J., Ives A. R.* Effects of species diversity on community biomass production change over the course of succession // Ecology. – 2007. – Vol. 88, № 4. – P. 929-939. (in English).
17. *Largouet C., Cordier M.-O., Fontenelle G.* Scenario templates to analyse qualitative ecosystem models // 18th World IMACS Congress and MODSIM09. – 2009. – P. 2129-2135. (in English).
18. *Ruzich R.V.* Stationary Points of two-dimension case of model of open Eigen's hypercycle / R.V. Ruzich // Suchasn. Probl. Prykl. Math. And Inform.: vseukr. nauk. conf., October 6-7, 2011, Lviv: proceedings. – Lviv: LNU, 2011. – P. 89. (in Ukrainian).
19. *Ruzich R.* Research of one point of equilibrium of model of unfastened hypercycle of Eigen in three-dimensional space / Roman Ruzich // The nonlinear analysis and application: 2nd international scientific conference on memory of corresponding member of National Academy of Science Valery Sergeevich Melnik, 4-6 April, 2012, Kyiv: book of abstracts. – Kiev: NTUU "KPI", 2012. – P. 91-92. (in English).
20. *Ruzich R.V.* Investigation of some stationary points of model of open Eigen's hypercycle in three-dimensional space / R.V. Ruzich // Dyferenc. rivn. i zastos. v pryklad. math.: vseukr. nauk. conf., June 11-13, 2012, Chernivci: proceedings. – Chernivci, 2012. – P. 128. (in Ukrainian).

Надійшла до редколегії 10.09.2013

УДК 519.925.51

Рутицька В.В.¹, к.т.н.

Якісний аналіз розв'язків задач оптимального інвестування

Розглядається задача про аналіз якісних властивостей розв'язків задач оптимального інвестування у цінні папери.

Ключові слова: математична модель, стійкість розв'язків, інвестиційний портфель

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т Глушкова, 4д
e-mail: vlarut@gmail.com

V.V. Rutytska¹, Ph.D.

Qualitative analysis of solutions of optimal investment problems

The problem of analysis of qualitative properties of optimal investment solutions for securities is investigated.

Key Words: mathematical model, stability of solutions, portfolio management

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03068, Kyiv, Glushkova ave., 4d
e-mail: vlarut@gmail.com

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

При математичному моделюванні інвестиційних процесів розглядають статичні та динамічні постановки задач. Г. Марковиць розробив теорію, яка стала вже класичною, прийняття інвестиційних рішень для задач у статичній постановці. Сучасні підходи, спираючись на відомі результати, дають можливість розвинути арсенал математичних методів, що можуть бути застосовані при прийнятті інвестиційних рішень.

Статичні задачі у постановках Г. Марковиця відносять до задач нелінійного програмування, тому якісний аналіз оптимальних розв'язків пов'язаний з дослідженням збурених розв'язків задач нелінійного моделювання.

Нехай цільова функція $I = I(x)$ визначена у n -вимірному евклідовому просторі в точці x_0 і є диференційовною. При цьому необхідною умовою існування екстремуму є рівність нулю частинних похідних першого порядку

$$\psi_i(x) = \frac{\partial I(x)}{\partial x_i} = 0, \quad i = \overline{1, n}.$$

Припустимо, що цільова функція залежить від скалярного параметра α : $I = I(x, \alpha)$. Очевидно, що і розв'язок x_0 є функцією цього параметра: $x_0 = x_0(\alpha)$, отже, його залежність від α , характеризується коефіцієнтами чутливості

$$\frac{dx_{0i}}{d\alpha}, \quad i = \overline{1, n}.$$

$$\text{Необхідні умови екстремуму запишемо так } \psi_i(x, \alpha) = \frac{\partial I(x, \alpha)}{\partial x_i} = 0, \quad i = \overline{1, n}.$$

Нехай функції $\psi_i(x, \alpha), i = \overline{1, n}$ задовольняють умовам теореми про диференціювання неявних функцій [2], тобто функції $\psi_1, \dots, \psi_n$ визначені і неперервні в околі точки (x_0, α) , існують неперервні в цій області частинні похідні:

$$\frac{\partial \psi_j}{\partial x_i}, \frac{\partial \psi_j}{\partial \alpha}, i, j = \overline{1, n} \quad \text{та} \quad \text{якобіан}$$

$$J = \frac{D(\psi_1, \dots, \psi_n)}{D(x_1, \dots, x_n)} = \det \left\{ \frac{\partial \psi_j}{\partial x_i} \right\}_{i,j=1}^n \quad \text{в точці } (x_0, \alpha)$$

відмінний від нуля.

Тоді, відповідно до теореми про диференціювання неявних функцій, існують неперервні коефіцієнти чутливості, що визначаються так:

$$\frac{dx_i}{d\alpha} = - \frac{\frac{D(\psi_1, \dots, \psi_n)}{D(x_1, \dots, x_{i-1}, \alpha, x_{i+1}, \dots, x_n)}}{\frac{D(\psi_1, \dots, \psi_n)}{D(x_1, \dots, x_n)}}.$$

Розглянемо задачу. Необхідно знайти екстремум цільової функції $I(x)$ при

обмеженнях $f_i(x) = 0, i = \overline{1, m}, m \leq n$. Для розв'язання даної задачі уведемо множники Лагранжа $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ та функцію Лагранжа

$$L(x, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) = I(x) - \sum_{j=1}^m \lambda_j f_j(x).$$

В цьому випадку необхідні умови екстремуму матимуть вигляд

$$\begin{cases} \frac{\partial I}{\partial x_i} - \sum_{j=1}^m \lambda_j \frac{\partial f_j}{\partial x_i} = 0, i = \overline{1, n}, \\ f_j(x) = 0, j = \overline{1, m}. \end{cases} \quad (1)$$

Нехай $I(x)$ та $f_i(x) = 0, i = \overline{1, m}$ залежать від параметра α і існують похідні від відповідних функцій за α . Очевидно, що величини $x_1, \dots, x_n, \lambda_1, \dots, \lambda_m$, які задовольняють системі (1), будуть також залежати від параметра α . Уведемо позначення:

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = \psi_i, i = \overline{1, n},$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda_j} = \psi_{n+j}, j = \overline{1, m}.$$

Припустимо, що при $\alpha = \alpha_0$ якобіан

$$J = \frac{D(\psi_1, \dots, \psi_{n+m})}{D(x_1, \dots, x_n, \lambda_1, \dots, \lambda_m)}$$
 відмінний від нуля,

тоді коефіцієнти чутливості в околі точки α_0 визначаються за формулами:

$$\frac{dx_i}{d\alpha} = -\frac{1}{J} * \frac{D(\psi_1, \dots, \psi_{n+m})}{D(x_1, \dots, x_{i-1}, \alpha, x_{i+1}, \dots, x_n, \lambda_1, \dots, \lambda_m)},$$

$$\frac{d\lambda_j}{d\alpha} = -\frac{1}{J} * \frac{D(\psi_1, \dots, \psi_{n+m})}{D(x_1, \dots, x_n, \lambda_1, \dots, \lambda_{j-1}, \alpha, \lambda_{j+1}, \dots, \lambda_m)},$$

$$i = \overline{1, n}, j = \overline{1, m}.$$

Розглянемо класичну задачу інвестиційного менеджменту: максимізувати очікувану прибутковість портфеля акцій для заданого рівня ризику. Запишемо цю задачу у векторно-матричному вигляді:

$$y^T m \rightarrow \max,$$

$$y^T V y = \tau.$$

Позначимо $y^T V y = I(y)$. Визначимо чутливість оптимальних вагових коефіцієнтів портфеля до варіації прибутковості деякої акції m_k при незмінному значенні рівня τ . У даному випадку розглянемо варіацію прибутковості акції m_n ,

$k = n$.

Запишемо функцію Лагранжа для даної задачі

$$L(y, \lambda) = \sum_{i=1}^n y_i m_i - \lambda(I(y) - \tau)$$
 та необхідні умови

екстремуму

$$\begin{cases} m_i - \lambda \frac{\partial I}{\partial y_i} = 0, i = \overline{1, n}, \\ I(y) = \tau. \end{cases}$$

Продиференціювавши дану систему за m_n , одержимо:

$$\begin{cases} \lambda \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 I}{\partial y_i \partial y_j} * \frac{\partial y_j}{\partial m_n} + \frac{\partial I}{\partial y_i} * \frac{\partial \lambda}{\partial m_n} = \begin{cases} 0, i \neq n \\ 1, i = n \end{cases}, i \in \overline{1, n}, \\ \sum_{j=1}^n \frac{\partial I}{\partial y_j} * \frac{\partial y_j}{\partial m_n} = 0. \end{cases}$$

Розділимо перші n рівнянь даної системи на λ і запишемо у векторно-матричному вигляді систему $Ab = c$, де:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial I}{\partial y_1} & \frac{\partial I}{\partial y_n} \\ \frac{\partial I}{\partial y_1} & \frac{\partial^2 I}{\partial y_1^2} & \frac{\partial^2 I}{\partial y_1 \partial y_n} \\ \frac{\partial I}{\partial y_n} & \frac{\partial^2 I}{\partial y_n \partial y_1} & \frac{\partial^2 I}{\partial y_n^2} \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda} * \frac{\partial \lambda}{\partial m_n} \\ \frac{\partial y_1}{\partial m_n} \\ \frac{\partial y_n}{\partial m_n} \end{pmatrix}, c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\lambda} \end{pmatrix}.$$

Ця система дозволяє знайти будь-який із коефіцієнтів чутливості $\frac{\partial y_i}{\partial m_n}, i = \overline{1, n}$.

Неважко бачити, що коефіцієнт $\frac{\partial y_n}{\partial m_n}$ можна

знайти за формулою $\frac{\partial y_n}{\partial m_n} = \frac{1}{\lambda} * \frac{A_{n+1, n+1}}{\det A}$, де

$A_{n+1, n+1}$ - алгебраїчне доповнення до елементу $\frac{\partial^2 I}{\partial y_n^2}$. При виконанні достатніх умов мінімуму

$$\frac{A_{n+1, n+1}}{\det A} < 0, \text{ з урахуванням того, що } \lambda > 0,$$

одержимо коефіцієнт чутливості $\frac{\partial y_n}{\partial m_n} < 0$.

Від'ємність його вказує, що при одному і тому ж рівні ризику τ із підвищенням прибутковості m_n , частку даного виду цінного паперу у складі

портфеля слід збільшити.

Розглянемо тепер задачу мінімізації ризику портфеля цінних паперів для встановленої величини прибутковості

$$I(y) \rightarrow \min,$$

$$y^T m = M.$$

Функція Лагранжа буде мати такий вигляд

$$L(y, \lambda) = I(y) - \lambda \left(\sum_{i=1}^n y_i m_i - M \right).$$

Запишемо необхідні умови екстремуму:

$$\begin{cases} \frac{\partial I}{\partial y_i} - \lambda m_i = 0, i = \overline{1, n}, \\ \sum_{i=1}^n y_i m_i - M = 0. \end{cases}$$

Розглянемо, як і у першому випадку, вплив малих змін прибутковості акції m_n на оптимальне рішення інвестора. Диференціюючи останню систему за m_n , отримаємо:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 I}{\partial y_i \partial y_j} * \frac{\partial y_j}{\partial m_n} + m_i * \frac{\partial \lambda}{\partial m_n} = \begin{cases} 0, i \neq n \\ \lambda, i = n \end{cases}, i \in \overline{1, n}, \\ \sum_{i=1}^n m_i \frac{\partial y_i}{\partial m_n} + y_n = 0. \end{cases}$$

Запишемо систему алгебраїчних рівнянь $Ab = c$ для знаходження функцій чутливості. У даному випадку:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & m_1 & m_n \\ m_1 & \frac{\partial^2 I}{\partial y_1^2} & \frac{\partial^2 I}{\partial y_1 \partial y_n} \\ m_n & \frac{\partial^2 I}{\partial y_n \partial y_1} & \frac{\partial^2 I}{\partial y_n^2} \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} \frac{\partial \lambda}{\partial m_n} \\ \frac{\partial y_1}{\partial m_n} \\ \frac{\partial y_n}{\partial m_n} \end{pmatrix}, c = \begin{pmatrix} -m_n \\ 0 \\ \lambda \end{pmatrix}.$$

Розв'язки цієї системи для будь-яких $i \in \overline{1, N}$ визначаються так:

$$\frac{\partial y_i}{\partial m_n} = \frac{1}{\det A} * (-m_n A_{1,n+1} + \lambda A_{n+1,n+1}),$$

де $A_{1,n+1}, A_{n+1,n+1}$ - алгебраїчні доповнення до елементів матриці A , які знаходяться на місцях $(1, n+1)$ та $(n+1, n+1)$.

Розглянемо математичну задачу про вплив варіації величини інвестованого капіталу M на оптимальне рішення інвестора щодо складу портфеля акцій. Для цього запишемо необхідні

умови екстремуму і продиференціюємо систему за M :

$$\sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 I}{\partial y_i \partial y_j} * \frac{\partial y_j}{\partial M} - m_i * \frac{\partial \lambda}{\partial M} = 0, i = \overline{1, n},$$

$$\sum_{i=1}^n m_i * \frac{\partial y_i}{\partial M} = 1,$$

$$b = \left(-\frac{\partial \lambda}{\partial M}, \frac{\partial y_1}{\partial M}, \dots, \frac{\partial y_n}{\partial M} \right)^T,$$

$$c = (1, 0, \dots, 0)^T.$$

$$\text{Звідси } \frac{\partial y_i}{\partial M} = \frac{A_{1,i+1}}{\det A}, i \in \overline{1, n}.$$

Порівнявши вирази для розв'язків у другому та третьому випадках, отримаємо:

$$\frac{\partial y_i}{\partial m_n} = -m_n \frac{\partial y_i}{\partial M} + \lambda \frac{A_{n+1,n+1}}{\det A}, i \in \overline{1, n}.$$

Дане співвідношення встановлює вплив зміни ринкових цін акцій на склад інвестиційних портфелів. Воно відповідає відомому у економіці рівнянню Слуцького, яке визначає вплив некомпенсованої зміни цін на попит для кожного виду продукції. Якщо $i = n$, то другий доданок у правій частині останнього рівняння буде пропорційним коефіцієнту чутливості $\frac{\partial y_i}{\partial m_n}$, який отримано в першій задачі. Тому для

$i = n$ можемо

записати:

$$\left(\frac{\partial y_n}{\partial m_n} \right)_{m_n} = -m_n \left(\frac{\partial y_n}{\partial M} \right)_M + \left(\frac{\partial y_n}{\partial m_n} \right)_{I=\tau}.$$

У даному співвідношенні індекси m_n , M , $I = \tau$ вказують на умови, при яких обчислюються відповідні коефіцієнти чутливості:

- а) при варіації прибутковості цінного паперу m_n ;
- б) при зміні величини інвестованого капіталу M ;
- в) при зміні заданого рівня толерантності ризику τ .

Аналізуючи якісні характеристики розв'язків динамічних систем серед інших звернемо увагу на початкові умови та фазові обмеження [1], [3].

Розглянемо динаміку формування вартості акції i -го типу на фондовому ринку, $t \in [t_0, T]$ - термін утримання інвестиційного портфеля:

$$\frac{dr_i(t)}{dt} = (\alpha_{i1} SM_{index}(t) + \alpha_{i2} IDI(t)) r_i(t) +$$

$$\sum_{j=1}^N \beta_{ij} r_j(t) + \xi_i(t), t \in [t_0, T].$$

Це лінійна система з нестационарними елементами на діагоналі.

У матричній формі математична модель формування вартості портфеля цінних паперів має вигляд [1]:

$$\frac{dr}{dt} = (B^{(1)} + b(t)\Lambda^{(1)} + c(t)\Lambda^{(2)})r + \xi(t), \quad (2)$$

$$t \in [t_0, T].$$

Однорідна система матиме вигляд

$$\frac{dr}{dt} = (B^{(1)} + b(t)\Lambda^{(1)} + c(t)\Lambda^{(2)})r. \quad (3)$$

Позначимо: $\lambda = (\lambda^{(1)T}, \lambda^{(2)T})^T$ - об'єднаний

вектор параметрів розмірності $2N$, де $\lambda^{(1)T} = (\alpha_{11}, \alpha_{21}, \dots, \alpha_{N1})$,

$$\lambda^{(2)T} = (\alpha_{12}, \alpha_{22}, \dots, \alpha_{N2}).$$

Початкові умови

$$r(t_0, \lambda) = r_0(\lambda), t_0 = t_0(\lambda).$$

У подальшому $\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}$ - N -вимірні вектори параметрів, які належать множині G_λ , $r(t, \alpha)$ -вектор фазових координат розмірності N , $r_0(\lambda), t_0(\lambda)$ - неперервно-диференційовні функції.

При практичному інвестуванні у цінні папери на реальному ринку є сенс розглянути лінійні та нелінійні обмеження на фазові координати і параметри системи (2). Дані обмеження задаються інвестором згідно з рівнем його фінансових очікувань та толерантності щодо ризику [2].

Означення. Розрахункова вартість портфеля цінних паперів, визначена системою (3), буде мати $\{G_0^r, G_0^\lambda, \Phi_t, t_0, T\}$ - оцінку, якщо

$r(t, \lambda) \in \Phi_t, t \in [t_0, T]$, для будь яких $r(t_0, \lambda) \in G_0^r$ та $\lambda \in G_0^\lambda$.

Тут Φ_t - допустима множина станів вектору r в момент $t \in [t_0, T]$ (тобто множина допустимих для інвестора значень вартості інвестиційного портфеля), G_0^r, G_0^λ - множини допустимих

початкових станів та параметрів системи (3) відповідно.

Дослідження стійкості системи (3) проводиться за допомогою функцій типу Ляпунова [2] за умови їх однозначності та неперервності разом із частинними похідними на множинах визначення.

Критерій. Якщо для системи (3) існує додатно-визначена функція Ляпунова $V(r, t, \lambda)$, яка задовольняє співвідношенням

$$\{r: V(r, t, \lambda) < 1\} \subset \Phi_t, t \in [t_0, T], \lambda \in G_0^\lambda,$$

$$\frac{\partial V(r, t, \lambda)}{\partial t} + grad_r^T V(r, t, \lambda) *$$

$$[(B^{(1)} + b(t)\Lambda^{(1)} + c(t)\Lambda^{(2)})r] \leq 0$$

при $\{r: V(r, t, \lambda) < 1\}, t \in [t_0, T]$ для довільних

$$\lambda \in G_0^\lambda,$$

$$G_0^r \subset \{r: V(r(t_0, \lambda), t_0, \lambda) < 1\} \text{ для довільних}$$

$$\lambda \in G_0^\lambda,$$

то розрахункова вартість портфеля цінних паперів $r(t, \lambda)$ системи (3) буде мати

$$\{G_0^r, G_0^\lambda, \Phi_t, t_0, T\} - \text{оцінку.}$$

В роботі розглянуто застосування методів практичної стійкості до розв'язання задач інвестування у цінні папери. Задачі сформульовано для різного виду цільових функцій, початкових і фазових обмежень.

Список використаних джерел

1. Bublik B.N., Garashchenko F.G., Kirichenko N.F. Structural and self-reactance optimization and stability of dynamics of bunches. -Kyiv, Naukova dumka, 1985. -304p. (in Russian).
2. Garashchenko F.G., Kulyan V.R., Rutitskaya V.V. Quality analysis of mathematical models of investment management. -Kyiv, //Cybernetics and computing engineering. - 2005. -N 148. -p.3-10. (in Russian).
3. Krylov I.A., Chernousko F.L. Algorithm of method of progressive approximations for the decision of optimal control problems. - Moscow, Nauka, 1971. -247p. (in Russian).

Надійшла до редколегії 05.09.2013р.

РАДІОФІЗИКА

УДК 519.9

S. A. Pud^{1*}, post grad. student,
M.V. Petrychuk¹, PhD,
V.F. Kovalenko¹, Dr.Sci., Prof.

Effect of gamma radiation treatment on transport properties of silicon nanowire field effect transistors

Here we report on silicon nanowire (NW) field effect transistor (FET) structures fabricated and their transport properties studied before and after gamma radiation treatment. I-V characteristics and noise spectra of Si NW FETs of different lengths demonstrate improvement of stability and scaling after irradiation treatment. The results are interpreted as strain relaxation in contact regions as well as changes of the charge state of dielectric traps after the influence of low doses of gamma irradiation. This approach is promising for nanoelectronic applications, including biosensors.

Keywords: nanowires, silicon, field effect transistors, noise spectroscopy, gamma radiation treatment.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4g, e-mail: s.pud@fz-juelich.de

Пуд С.О.^{1,*}, аспірант,
Петричук М.В.¹, к.ф.-м.н., с.н.с.,
Коваленко В.Ф.¹, д.ф.-м.н., проф.

Вплив гамма радіації на транспортні властивості польових транзисторів на базі кремнієвих нанониток

Представлено результати по виготовленню та подальшому дослідженню електрофізичних властивостей польових транзисторів на базі кремнієвих нанониток до та після обробки малими дозами гамма радіації. Виміряні вольт-амперні характеристики показують покращення стабільності та відтворюваності після обробки радіацією. Зміни у транспорті під дією малих доз гамма опромінення інтерпретовано, як релаксацію механічних напружень в контактних областях транзисторів, а також як зміну зарядових станів пасток в затворному діелектрику. Розроблений підхід є багатообіцяючим для застосувань в наноелектроніці, включаючи біосенсорні застосування.

Ключові слова: нанонитки, кремній, польовий транзистор, шумова спектроскопія, опромінення гамма радіацією.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4г, e-mail: s.pud@fz-juelich.de

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Скришевський В.А.

Introduction

Novel test structures fabricated on the basis of Si nanowires are the ultimate building blocks for future nanoelectronics[1] and biological sensor applications [2]. These structures should be stable in operation. However, a great many factors influence their reliability and stability of such devices, especially in the nanowire channel. One of the factors is the stress effect in oxidized Si nanowires[3]. Also the degradation processes in nanochannel FETs are very large compared with negligible degradation for conventional MOSFETs[4]. The measured I-V characteristics of poly-Si FETs demonstrate Joule heating degradation of the structures[5]. In addition, hot carriers may generate the interface traps resulting in degradation of the FET threshold voltage [6]. It has already been

demonstrated that Si nanowire structure performance is related to the microstructure of ohmic contacts to NWs[7].

In this paper, we report on the transport and noise properties of silicon nanowire field effect transistors with different channel lengths. We applied low-dose gamma irradiation treatment to the samples to obtain improved contact regions and more stable and reproducible operation of the test device structures.

Experimental details

The structures under study were fabricated on the basis of SOI wafers with a 150 nm buried oxide (BOX) layer using nanoimprint technology. The thickness of Si layer (Si<100>, boron-doped 14–22 Ohm*cm) was 50 nm with p-type doping of $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. High-quality nanowires with low defect

density were obtained by tetramethylammonium hydroxide (TMAH) chemical wet etching. The lengths of the fabricated devices varied from 2 μm to 16 μm with widths of 250 nm. A scanning electron microscope (SEM) image of one of the nanowire is shown in Fig.1. Si contact pads were doped by ion implantation of As atoms with an energy of 8 keV, dose $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, and were subsequently annealed at 950°C for 30 sec in nitrogen atmosphere to activate the implanted ions and improve the electrical performance of the devices. A thin SiO_2 dielectric layer with a thickness of 100nm was thermally grown to achieve stable surface passivation of Si NWs. The conductivity of the samples was modified by applying a voltage to the substrate used as the gate electrode.

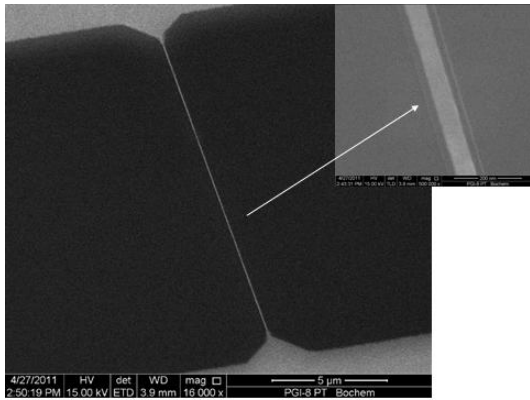


Fig. 1 Scanning electron microscope image of fabricated silicon nanowire. Scale bar is 5 μm . Insert: enlarged image of the NW with width of 250 nm.

Characterization of Si NW FETs

The electrical properties of the back-gated nanowire FETs were studied using I-V characteristics and low-frequency noise spectra measurements at room temperature. A low-noise noise measurement setup was developed in-house based on an amplifier with a low level of intrinsic input-related thermal noise of $2 \times 10^{-18} \text{ V}^2 \text{ Hz}^{-1}$, which enables the peculiarities of noise spectra to be studied in the frequency range from 1 Hz to 100 kHz and the characteristic parameters of the structures to be extracted as a function of channel length. Transfer characteristics of the Si NW devices of different lengths are shown in Fig. 2. A characteristic feature of these samples is a slow drift (decrease) of the drain current when drain-source voltage, V_{DS} , is applied during long time about two hours. Transfer characteristics registered in the short-time regime (5 minutes after applying the voltage) and after a longer period (2 hours) differ. In the second case, the measurements were performed after the establishment of the quasi-steady state. In spite of a decrease in current in the steady-state regime, there

was no change registered in the threshold voltage V_{th} , determined as: -1.26 V

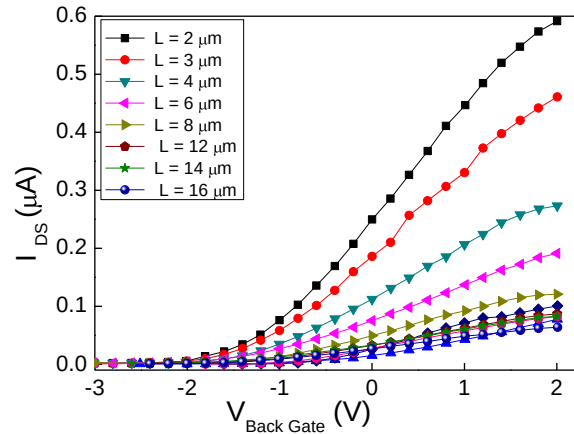


Fig. 2 Transfer characteristics measured for Si NW FETs of different lengths, listed in the figure, at $V_{DS} = 100 \text{ mV}$.

In addition, at negative gate voltages a significant uncontrolled subthreshold current was registered. This current has a tendency to increase with increasing of negative voltages V_{BG} from -2 to -3 V. The dependence of the resistance of the samples on length demonstrates a good enough scalability with length, except for the samples of the smallest lengths, where we found that the contact resistance should be taken into account.

Noise measurements of samples of different lengths showed that the spectra mostly demonstrate $1/f$ behavior. A study of noise as a function of gate voltage showed that the main source of noise is the exchange process of the carriers with traps in the dielectric layer. This process can be described by the McWhorter model. The input-related noise spectral density is usually used to analyze the noise properties of the structures. Such equivalent input noise voltage at the gate was determined in accordance with the following expression:

$$S_U = \frac{S_I}{g_m^2} \quad (1)$$

where S_I is the current channel noise, g_m is the transistor transconductance, which can be determined from the slope of the transfer characteristic of the transistor using the following expression:

$$g_m = \frac{\partial I_{DS}}{\partial V_{BG}} \quad (2)$$

However, in some cases well-resolved Lorentzian noise components were registered in the

spectra above the flicker noise. The Lorentzians were observed in the spectra of short samples at high gate voltages. Typical families of spectra measured for samples with a length of 2 μm length are shown in Fig. 3. The roll-off of the spectrum at $f > 3$ kHz is due to the input capacitance of the low-noise amplifier with a large equivalent resistance of the circuit ($R_{eq} = 100$ kOhm), therefore $f_{cutoff} = 1/RC$ is about 3 kHz.

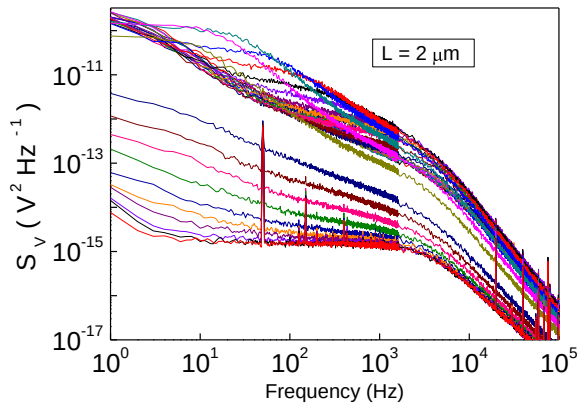


Fig. 3. Measured noise spectral density for Si NW FET sample of length $L = 2 \mu\text{m}$ at gate voltages from 2V to -2V.

The $1/f$ noise level at the frequency of $f = 1$ Hz is selected as the parameter. The dependence of this parameter on the gate voltage is used to obtain the input-related noise spectral density, S_U , as a function of V_G , shown in Fig.4.

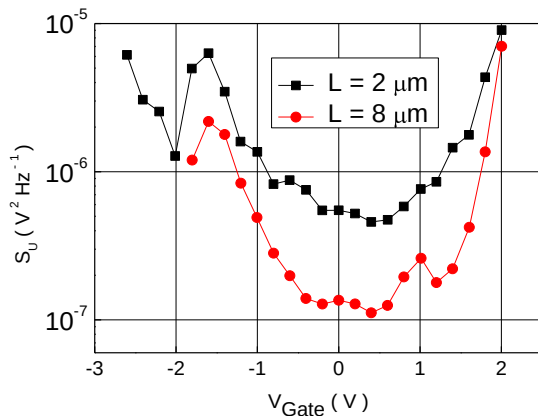


Fig. 4. The input-related noise spectral density, S_U , as a function of V_{BG} , obtained for Si NW FETs of different lengths.

These dependences are typical of metal oxide semiconductor field effect transistor (MOSFET) structures. A weak dependence is observed in the accumulation regime at high voltages and a sharp decrease in the subthreshold regime.

The fact that the observed dependence has a flat region confirms the applicability of the McWhorter model in this case, where:

$$S_U(f) = \frac{kTq^2\lambda N_{ot}(E_F)}{fWLC_0^2} \sim \frac{1}{WL}, \quad (3)$$

where $N_{ot}(E_F)$ – trap density in the dielectric, $C_0 = \epsilon_{ox}/t_{ox}$ is the gate insulator capacitance per unit area, ϵ_{ox} is the permittivity of the dielectric layer, t_{ox} is the oxide thickness, $\lambda = \sqrt{\hbar^2/2m_z^*\phi_B} = 10^{-8}$ is the tunneling distance, W is the width of the sample. Using (3) we can determine the density of active sites in the lower dielectric, substituting the $\epsilon_{ox} = 3.9 \epsilon_0$ and $t_{ox} = 150$ nm, $S_U = 10^{-7}$, $L = 10 \mu\text{m}$, $W = 0.25 \mu\text{m}$: N_{ot} is about $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$. This value is not as high as that obtained for high-quality bulk Si material [8].

Electric properties of Si NW FETs before and after gamma radiation treatment

Typical noise characteristics of Si NW FETs measured before and after gamma radiation treatment using ^{60}Co are shown in Fig.5. The measurements were performed in the linear regime at $V_{DS} = 100$ mV for samples with the same width of 250 nm and different lengths. Decreased scattering in the structure characteristics is found after treatment. The characteristic behavior of structures differs for short and long samples.

In the strong inversion (high currents) in the samples before irradiation (lengths $L = 2 \mu\text{m}$ and $8 \mu\text{m}$) and in the sample of length $L = 2 \mu\text{m}$ after irradiation, the dependence of the noise on the current follows $S_I/I^2 \sim 1/I^2$. At the same time, in a sample of length $L = 8 \mu\text{m}$ after irradiation the behavior is different and the normalized current density follows $S_I/I^2 \sim 1/I$ and is proportional to the inverse current. The first dependence is typical of the noise determined by the near-contact region, the second is characteristic of noise related to channel transport. It is obvious that in a short sample the influence and contribution of contacts into the noise properties of the samples is higher than in the case of long samples. Thus in the case of short samples in the strong inversion mainly the noise related to near-contact regions was registered and the noise related to the channel phenomena was registered in the case of long samples before and after irradiation. After gamma radiation treatment, the contact contribution became negligible and the noise results for short-channel samples also showed channel-related properties.

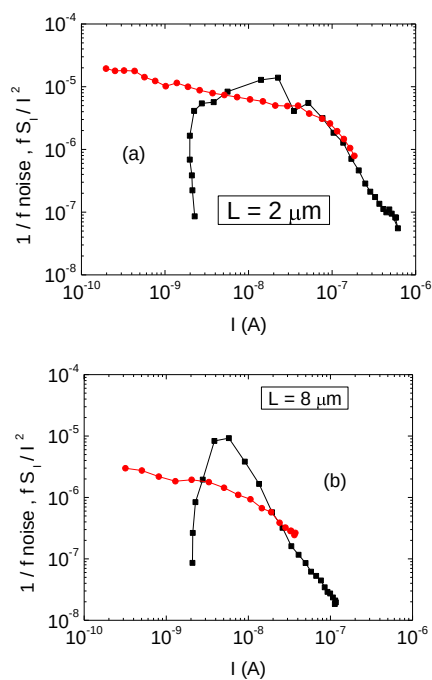


Fig. 5. Normalized current spectral density of $1/f$ noise component, measured for the sample with length of $2\ \mu\text{m}$ (a) and $8\ \mu\text{m}$ (b) before irradiation (black circles) and after irradiation (red circles).

Irradiation leads to the removal of mechanical stress in the contact region, which also reduces $1/f$ noises. In addition, normalized flicker noise demonstrates different length dependences for samples with short lengths (Fig.6) before and after irradiation.

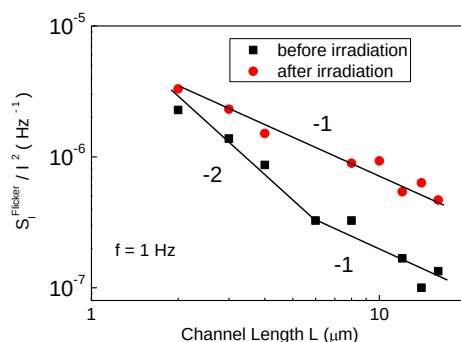


Fig. 6. Normalized current spectral density of the flicker noise component versus sample length, $V_{DS}=100\ \text{mV}$ and $V_G-V_{th}=0.5\ \text{V}$.

We have found that the normalized current noise spectral density decreases as $1/L^2$ in the samples with lengths of less than $7\ \mu\text{m}$. Such dependence is characteristic for the major contact contribution to the noise properties. At the same time, in relatively long samples the behaviour changed to $1/L$

dependence, demonstrating the priority of channel noise. The latter dependence was also registered for samples with small lengths after gamma irradiation, reflecting the positive effect of the irradiation due to stress relaxation in the contact regions [9] as well as increased stability of the structures and decreased scattering in the characteristics. The results demonstrate the positive effect of irradiation on the stability and reliability of the structure parameters.

References

1. Rurali R. Colloquium: structural, electronic, and transport properties of silicon nanowires // Rev. of Modern Phys. – 2010. – N. 82. – P. 427-449.
2. Timko B.P., Cohen-Karni T., Tian B., Lieber Ch.M. Design and implementation of functional nanoelectronic interfaces with biomolecules, cells, and tissue using nanowire device arrays // IEEE Trans. Nanotechnol. – 2010. – N.9. – P. 269-280.
3. Stan G., Krylyuk S., Davydov A.V., Cook R.F. Compressive stress effect on the radial elastic modulus of oxidized Si nanowires // NanoLetters. – 2010. – N.10. – P.2031-2037.
4. Jiao G.F., Chen Z.X., Yu H.Y., Huang D.M., Kwong D.L., Li M.F. Experimental studies of reliability issues in tunneling field effect transistors // IEEE El. Dev. Lett. – 2010. – N 31. – P. 396-398.
5. Kasakawa T., Tabata H., Onodera R., Kojima H., Kimura M., Hara H., Inoue S. Degradation evaluation of Poly-Si TFTs by comparing normal and reverse characteristics and behavior analysis of hot-carrier degradation // Sol. St. Electr. – 2010. – N 56. – P. 207-201.
6. Hu M., Yamane T., Tsuchia T. The generation process of interface traps by hot-carrier injection in nanoscale metal-oxide-semiconductor field-effect transistors // Jap. Journ. Appl. Phys. – 2012. – N 51. – P. 02BC09-02BC09-5.
7. Motayed A., Bonevich J.E., Krylyuk S., Davydov A.V., Aluri G., Rao M.V. Correlation between the performance and microstructure of Ti/Al/Ti/Au Ohmic contacts to p-type silicon nanowires // Nanotechnology. – 2011. – N 22. – P. 075206-1-075206-6.
8. Jomaah J., Fadlallah M., Ghibaudo G. Low Frequency Noise Analysis in Advanced CMOS Devices // Adv. Mater. Res. – 2011. – N 324 – P. 441-444.
9. Allain P.E., Roux X.L., Parrain F., Bosseboeuf A. Large initial compressive stress in top-down fabricated silicon nanowires evidence by static buckling // J. Micromech. Microeng. – 2013. N 23. – P. 015014-1-015014-8

Надійшла до редколегії: 20.09.13

УДК 536.423.4:531.3

Коваленко В.Ф.¹, д.ф.-м.н., проф.,
Петричук М.В.¹, к.ф.-м.н., с.н.с.,
Танигін Б.М.¹, к.ф.-м.н.,
Шулима С.І.^{1*}, аспірант.

Особливості поведінки кластерів в магнітній рідині при її циклічному нагріванні та охолодженні в магнітному полі

Досліджено вплив циклічного нагрівання та охолодження на властивості кластерів в магнітній рідині, виготовленій на основі наночастинок магнетиту. Нагрівання шару магнітної рідини з такими кластерами призводить до вирівнювання концентрацій між високо- та низькоконцентрованими фазами. Температура вирівнювання концентрацій фаз була визначена при різних значеннях зовнішнього постійного магнітного поля, прикладеного паралельно до шару магнітної рідини. Було отримано температуру руйнування періодичної структури магнітних кластерів, сформованих при охолодженні однорідної фази магнітної рідини, при різних значеннях величини прикладеного зовнішнього магнітного.

Ключові слова: магнітна рідина, рідинно-крапельний кластер, голкоподібний кластер.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03022, м. Київ, пр-т. Глушкова, 4г,

*E-mail: kiw_88@mail.ru

V. F. Kovalenko¹, Dr.Sci., Prof.,
M. V. Petrychuk¹, Ph.D.,
B. M. Tanygin¹, Ph.D.,
S. I. Shulyma^{1*}, post grad. student.

Features of the behavior clusters in the ferrofluid upon its cyclic heating and cooling in a magnetic field

The influence of the cyclic heating and cooling on properties of the clusters in a ferrofluid, which made on the basis of magnetite nanoparticles, are investigated. The heating of the ferrofluid layer with such clusters leads to equalization of the concentration between high- and lowconcentrated phases. The temperature of the equalization of the phase concentrations was determined at different values of an external constant magnetic field, which was applied parallel to the layer of the ferrofluid. The temperature of the destruction of a periodic structure of the magnetic clusters, which were formed during cooling of a homogeneous phase of the ferrofluid, was obtained at the different values of the applied external magnetic field.

Key Words: ferrofluid, liquid-droplet cluster, needle-like cluster.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03022, Kyiv, Glushkova st., 4g,

*E-mail: kiw_88@mail.ru

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов І.О.

Вступ

Магнітні рідини (МР) – це колоїдні розчини магнітних наночастинок в рідині-носієві. В останні роки зростаючий інтерес до МР пов'язаний із перспективою використання їх для різних прикладних цілей: доставки ліків у визначене місце в організмі [2], гіпертермії [3], як агент для магнітно-резонансної томографії [4] та інше [5, 6].

За внутрішньою структурою МР можна розділити на два типи: 1) МР, що містить рідинно-крапельні кластери (РКК) [7], та 2) МР, що містить жорсткі кластери [8]. Інтерес до

дослідження МР із РКК пов'язаний із широким застосуванням аерозолів у техніці та побуті, а також необхідністю сформувати більш повні знання про МР в цілому.

Поведінка МР із РКК досить ґрунтовно досліджена в [1], проте роботи по циклічному нагріванню та охолодженню такої МР в присутності зовнішнього постійного дотичного магнітного поля нам не відомі. Відомо [9], що в процесі охолодження попередньо нагрітого шару МР утворювалася самоорганізована періодична структура РКК. Така структура з'являлася при охолодженні в магнітному полі, прикладеному

перпендикулярно до площини шару МР. Проте не досліджувалася поведінка великих РКК (ВРКК) (об'єм яких складав: $V_c = 0.06-0.13 \text{ мм}^3$) в магнітному полі, що важливо для більш детального пояснення структурних особливостей МР.

Таким чином, метою цієї роботи є дослідження впливу процесу циклічного нагрівання та охолодження на властивості і структуру ВРКК в зовнішньому постійному магнітному полі, орієнтованому паралельно до площини шару МР.

Умови експерименту

В роботі використовувалась МР типу магнетит в керосині. В якості антикоагулянта використовувалась олеїнова кислота. Об'ємна концентрація дисперсної фази МР складала 12 %.

МР розміщувалась в контейнері, утвореному, з одного боку, підкладкою із покритого прозорим електропровідним шаром скла, а з другого боку – покрівельним склом, відстань між якими була $\sim 100 \text{ мкм}$. Нагрівання шару МР здійснювалося за рахунок пропускання електричного струму через електропровідну плівку, яка була нанесена на зовнішній поверхні підкладки. Вимірювання температури здійснювалось за допомогою термодатчика DS1820, що контактував із підкладкою.

Магнітне поле із напруженістю $\sim 1 \text{ кЕ}$, яке утворювалось за допомогою прикладання до поверхні покрівельного скла постійного магніту, застосовувалось для формування в магнітній рідині ВРКК (рис.1 а).

Зовнішнє магнітне поле в площині шару МР створювалось за допомогою котушок Гельмгольца, через які пропускався постійний струм від джерела живлення. Зміною величини струму встановлювалась напруженість зовнішнього магнітного поля в межах від 0 до 1500 Е. Величина напруженості магнітного поля вимірювалась за допомогою датчика магнітного поля SS490. Неоднорідність напруженості магнітного поля в місці розташування нагрівача з МР складала менше 2%.

За допомогою CMOS камери, приєднаної до комп'ютера, можна було візуально спостерігати і фіксувати зображення результатів впливу нагрівання на розміри і властивості РКК.

Результати та їх обговорення

Нагрівання МР із ВРКК без магнітного поля.

Було показано, що в процесі нагрівання МР із ВРКК відбувається руйнування структури

ВРКК, тобто вирівнювання концентрацій між високо- та низькоконцентрованими фазами МР (рис. 1б). При $T=52-56^\circ\text{C}$ ВРКК повністю трансформуються в однорідну фазу МР, що пов'язано із перевищенням теплової енергії броунівського руху над енергією поверхневого натягу кластера.

Подальше охолодження МР призводить до утворення масиву із малих РКК, що мають близьку до сферичної форму (рис.2 а, б). При повторному нагріванні шару МР знову відбувалося вирівнювання концентрацій між висококонцентрованою і низькоконцентрованою фазами МР (як і при першому нагріванні) (рис.3). Охолодження однорідної фази МР призводить до утворення аналогічної сукупності РКК, що й при першому охолодженні (рис.2).

ВРКК в магнітному полі.

В зовнішньому магнітному полі ВРКК трансформувалися в сукупність (не обов'язково окремих) витягнутих вздовж напрямку магнітного поля голкоподібних кластерів (ГК) (рис.4). Довжина кластерів зростала із збільшенням напруженості магнітного поля (рис.5). При значеннях напруженості зовнішнього магнітного поля $H < 100 \text{ Е}$ ГК повністю не розділялися, а були з'єднані між собою у перпендикулярному до зовнішнього магнітного поля напрямку перемичкою із магнітних кластерів (рис.4 а). При значеннях напруженості магнітного поля $H > 100 \text{ Е}$ із ВРКК утворювалися розділені ГК (рис.4 в). Це пов'язуємо з тим, що при $H < 100 \text{ Е}$ енергія поверхневого натягу деформованого ВРКК залишалася більшою, ніж магнітостатична енергія системи розділених кластерів.

Нагрівання ВРКК в магнітному полі.

В даній роботі нами було виконано 5 циклів вимірювань при кожному значенні величини магнітного поля. Кожен цикл являв собою два послідовних процеси нагрівання-охолодження. З ростом температури в шарі МР в зовнішньому магнітному полі ГК (як з'єднані між собою, так і розділені) починали витягуватися вздовж напрямку магнітного поля. З'єднані кластери повністю розділялися при значенні поля $H = 50 \text{ Е}$ вже при температурі $T = 30-36^\circ\text{C}$ (рис.5).

Підвищення температури призводить до збільшення інтенсивності теплових коливань, і при температурі $T = 30-36^\circ\text{C}$ перемички (структури, що з'єднують ГК в перпендикулярному до магнітного поля

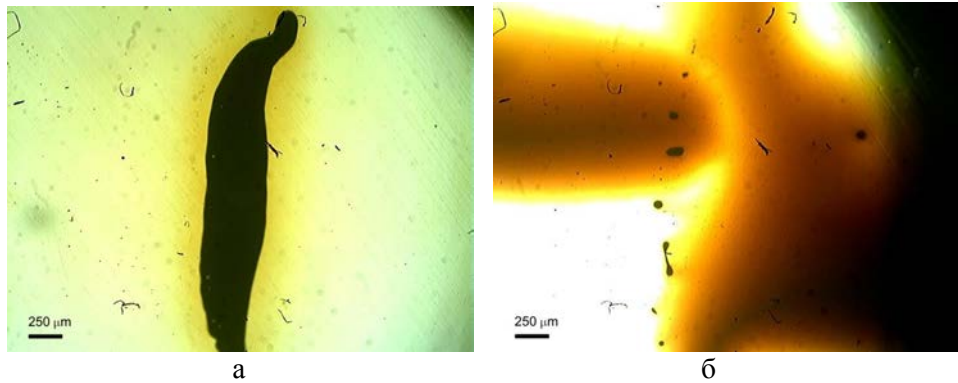


Рис.1. Трансформація ВРКК при нагріванні МР: а) $T=26\text{ }^{\circ}\text{C}$ (до нагрівання); б) $T=55\text{ }^{\circ}\text{C}$ (повне руйнування початкової структури)

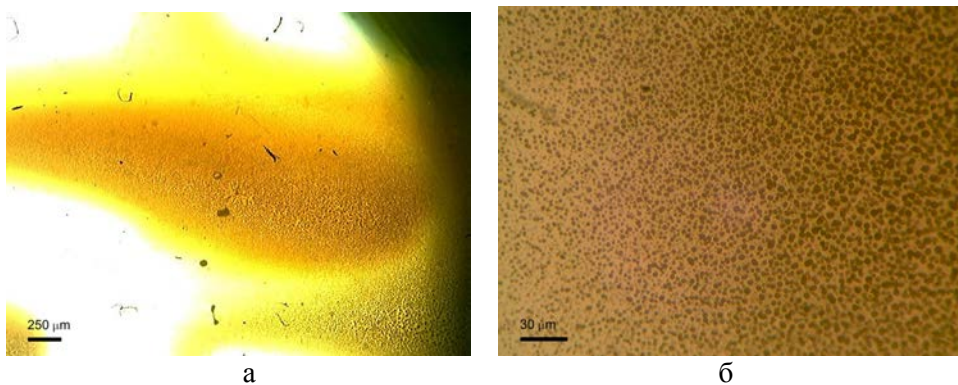


Рис.2. Масив РКК при фіксованій температурі $T=45\text{ }^{\circ}\text{C}$ (на фотографіях а, б – різні масштаби)

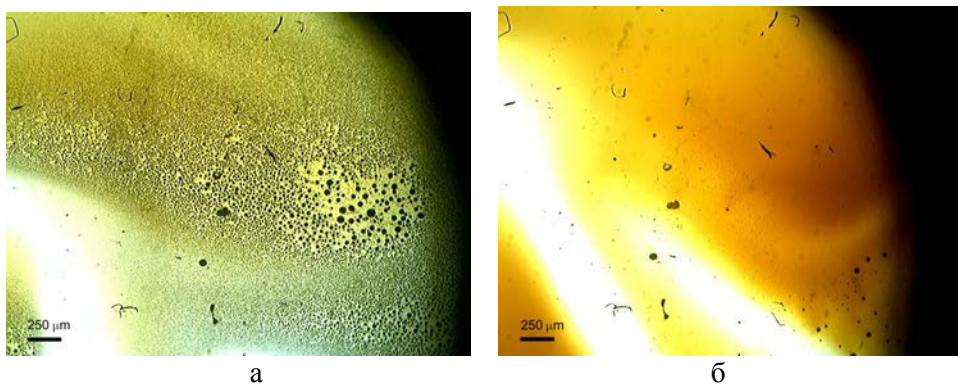


Рис.3. Трансформація масиву РКК при повторному нагріванні МР: а) $T=26\text{ }^{\circ}\text{C}$ (до повторного нагрівання); б) $T=56\text{ }^{\circ}\text{C}$ (вирівнювання концентрацій при повторному нагріванні)

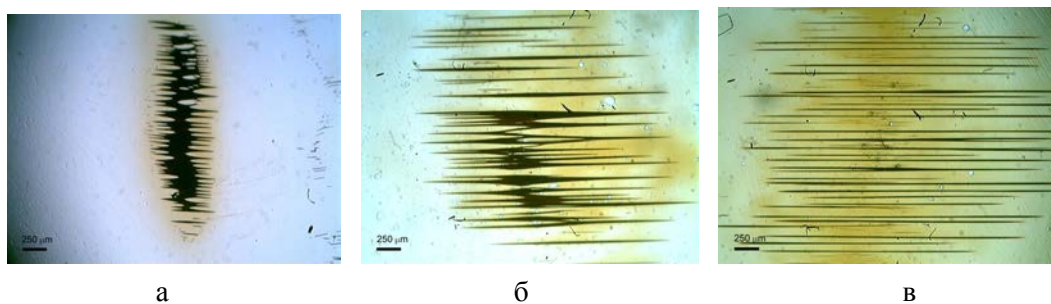


Рис.4. Трансформація ВРКК в магнітному полі при $T=26\text{ }^{\circ}\text{C}$: а) $H=30\text{ E}$; б) $H=100\text{ E}$; в) $H=1300\text{ E}$

напрямку) руйнуються. (Для МР із іншою концентрацією дисперсної фази ця температура може відрізнитись). Структура ГК при цьому залишається незмінною. Подальше нагрівання МР призводить до руйнування структури ГК і утворення однорідної фази МР, аналогічної тій, що зображена на рис.1 б. Температура руйнування структури ГК слабо залежить від напруженості зовнішнього магнітного поля (рис.6) і складає величину в діапазоні $T=52-54^{\circ}\text{C}$. Нахил лінеаризованої кривої (рис.6) складає величину $\sim 1.1 \cdot 10^{-3}^{\circ}\text{C/E}$.

При охолодженні однорідної фази МР в магнітному полі знову утворюється квазіперіодична структура із РКК. На відміну від випадку, коли магнітне поле відсутнє, структура являє собою не сфероподібні (рис.2), а ГК

(рис.7). При повторному нагріванні МР в магнітному полі відбувалося руйнування ГК, проте температура руйнування структури, на відміну від першого нагрівання, зменшувалася із ростом магнітного поля (рис.8). Нахил лінеаризованої кривої (рис.8) складає величину $\sim 3.4 \cdot 10^{-3}^{\circ}\text{C/E}$.

Обговорення результатів.

Для пояснення того факту, що при повторному нагріванні, на відміну від первинного нагрівання, збільшення напруженості магнітного поля призводить до зменшення температури руйнування структури, ми пропонуємо наступну модель, пов'язану із зміною внутрішнього порядку наночастинок у ВРКК.

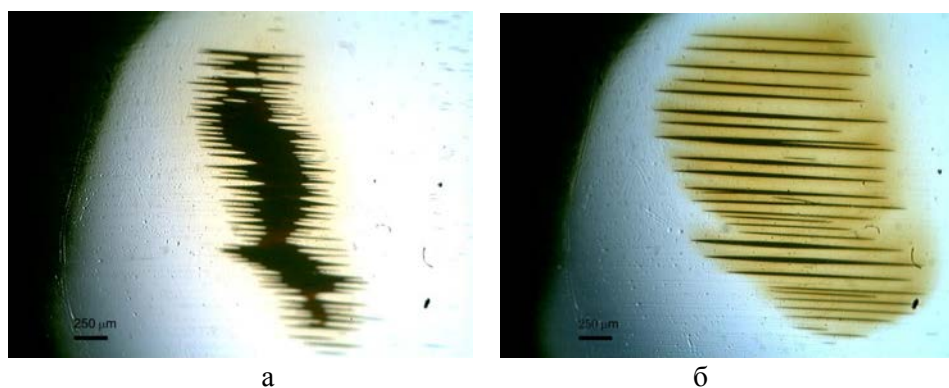


Рис.5. Утворення періодичної структури ГК при $H=50$ Е: нагрівання шару МР від кімнатної температури $T=26^{\circ}\text{C}$ (а) до температури $T=35^{\circ}\text{C}$ (б)

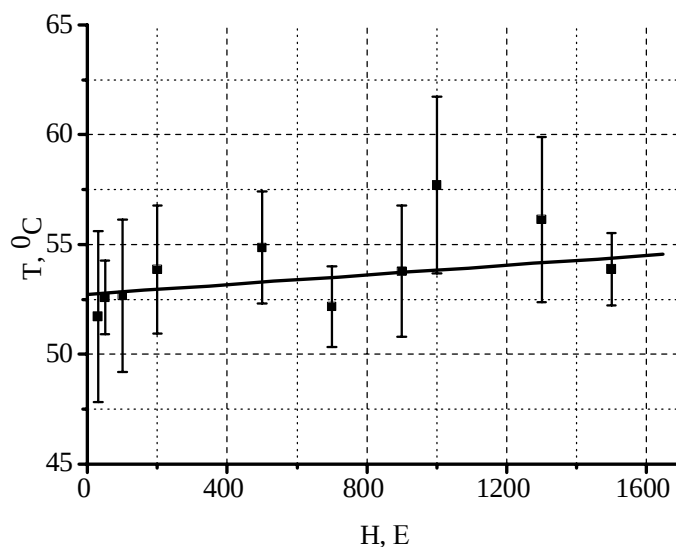


Рис.6. Залежність температури руйнування структури ГК в МР від величини напруженості магнітного поля

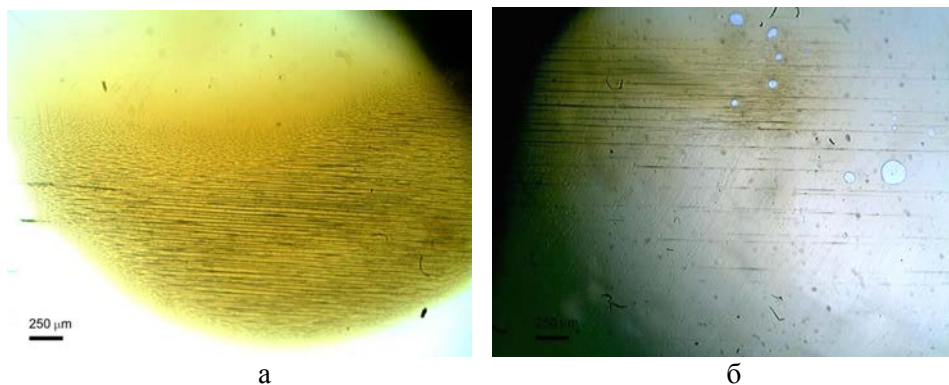


Рис.7. Структура ГК (при $T=40\text{ }^{\circ}\text{C}$), утворена при охолодженні однорідної фази МР в магнітному полі: а) $H=50\text{ E}$; б) $H=1300\text{ E}$

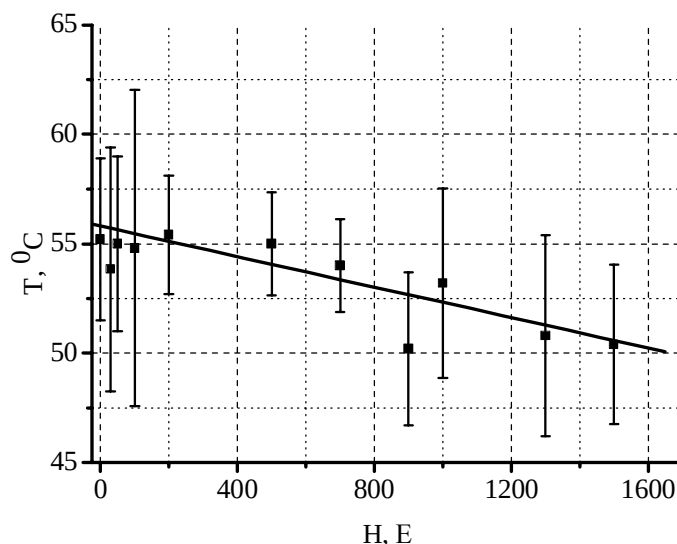


Рис.8. Залежність температури руйнування структури кластерів від величини напруженості магнітного поля при повторному нагріванні в магнітному полі

Спочатку наночастинки в ВРКК утворювали клубок із ниток первинних кластерів, досить жорсткий, щоб не руйнуватися під дією магнітного поля. Цей випадок аналогічний до властивості самого первинного кластера, який залишається з вихровою структурою в слабких магнітних полях [10]. Після первинного охолодження МР в магнітному полі клубок із ниток кластерів перетворюється в систему слабо взаємодіючих паралельних ниток кластерів, яка стає чутливішою до впливу зовнішнього магнітного поля і температури.

Із збільшенням величини магнітного поля ГК мають тенденцію до розділення вздовж напрямку поля, що сприяє зниженню температури

вирівнювання між високо- і низькоконцентрованою фазами МР.

Висновки

В даній роботі було досліджено особливості поведінки великих рідинно-крапельних кластерів при їх циклічному нагріванні та охолодженні у магнітному полі і зроблено наступні висновки:

1. При нагріванні магнітної рідини із великими рідинно-крапельними або голкоподібними кластерами відбувається руйнування структури таких кластерів, що, вочевидь, пов'язано із перевищенням теплової енергії броунівського руху над енергією поверхневого натягу кластера при підвищенні температури.

2. Структура рідинно-крапельних кластерів, що існує до нагрівання, повністю руйнується при $T=52-56^{\circ}\text{C}$ незалежно від величини прикладеного магнітного поля, утворюючи однорідну фазу магнітної рідини без рідинно-крапельних кластерів.

3. Охолодження однорідної магнітної рідини в магнітному полі/без магнітного поля призводить до утворення структури голкоподібних/сферичних рідинно-крапельних кластерів. Такі структури новоутворених кластерів зумовлені мінімізацією повної енергії системи.

4. При повторному нагріванні магнітної рідини в магнітному полі відбувається руйнування системи голкоподібних кластерів. Температура, при якій відбувалось руйнування такої структури, зменшується із ростом напруженості магнітного поля. Така поведінка, на нашу думку, пов'язана із зміною внутрішнього порядку наночастинок в рідинно-крапельних кластерах.

Список використаних джерел

1. Blum Ye.Ya., Mayorov M.M., Tsebers A.O. *Magnitnye zhudkosti*. – Riga: Zinatne, 1986. – 386 p. (in Russian).
2. Lübke A.S., Bergemann C., Hunt W., Fricke T., Reiss H., Brock J.W., Huhn D. Preclinical experiences with magnetic drug targeting: tolerance and efficacy // *Cancer Res.* – 1996. – **56**. – P.4694-4701.
3. Jordan A., Scholz R., Wust P., Fähling H., Felix R. Magnetic fluid hyperthermia (MFH): Cancer treatment with AC magnetic induced excitation of biocompatible superparamagnetic nanoparticles // *J. Magn. Magn. Mater.* – 1999. – **201**. – P.413-419.
4. Kim D.K., Zhang Y., Kehr J., Klason T., Bjelke B., Muhammed M. Characterization and MRI study of surfactant-coated superparamagnetic nanoparticles administered into the rat brain // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2001. – **225**. – P.256-261.
5. Shimada K., Shuchi S., Kanno H., Wu Y., Kamiyama S. Magnetic cluster and its applications // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2005. – **289**. – P.9-12.
6. Yellen B.B., Friedman G., Barbee K.A. Programmable self-aligning ferrofluid mask for lithographic applications // *IEEE Trans. on Magn.* – 2004. – **40**, №4. – P. 2994-2996.
7. Bacri J.C., Salin D., Massart R. Study of the deformation of ferrofluid droplets in a magnetic field // *J. Physique-Lett.* – 1982. – **43**, №6. – P.179-184.
8. Antonyuk O.A., Kovalenko V.F., Moldovan B.N., Petrychuk M.V. Periodicheskaya struktura igolchatykh magnitnykh klasterov v magnitnoy zhudkosti // *ZhTF.* – 2005. – **75**, №6. – P.93-97. (in Russian).
9. Ke Y.H., Yang S.Y., Horng H.E., Hong Chin-Yin, Yang H.C. Evolution of the initially ordered structure in a magnetic fluid film during a thermal cycle // *Eur. Phys. Journal B.* – 2004 – **41**. – P.319-324.
10. Tanygin B.M., Kovalenko V.F., Petrychuk M.V., Dzyan S.A. Molecular dynamics study of the primary ferrofluid aggregate formation // *JMMM.* – 2012. – **324**, №23. – P.4006-4010.

Надійшла до редколегії: 19.09.2013

УДК 621.383

Козинець О.В., к.ф.-м.н

Розрахунок фотоструму кремнієвого сонячного елемента з модифікованим шаром

Створення аморфізованого шару в області просторового заряду кремнієвого сонячного елемента на основі р-п переходу може забезпечити зростання фотоструму внаслідок поглинання фотонів з енергією $h\nu < 1.12 \text{ eV}$. Оптимальні параметри шару визначено на основі числового моделювання та аналітичних розрахунків.

Ключові слова: сонячний елемент, фотострум, шар

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: alk@univ.kiev.ua

O. V. Kozinets, Ph.D

Calculation of the photocurrent for silicon solar cell based on p-n junction with modified layer

The insertion of amorphized layer within depletion region of silicon p-n junction is shown to increase the photocurrent due to photon infrared absorption $h\nu < 1.12 \text{ eV}$. The optimal layer parameters (barrier height, position) were determined with help of numerical modelling and analytical calculation.

Key Words: solar cell, photocurrent, layer.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: alk@univ.kiev

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Скришевський В.А.

Вступ

Приблизно 38% фотонів в спектрі АМ1,5 мають енергію меншу ніж ширина забороненої зони кремнію 1.12 eV. Один із напрямків пошуку можливостей збільшити ефективність сучасних кремнієвих фотоперетворювачів пов'язаний із додатковим поглинанням квантів сонячного випромінювання з енергією $h\nu < 1.12 \text{ eV}$. В основі цього підходу лежить явище домішкового фотовольтаїчного ефекту за участю системи енергетичних рівнів в забороненій зоні кремнію для двоступеневої генерації електронно-діркової пари. Такі рівні можуть виникати внаслідок імплантації певних домішок (C, Ge, S, Te) та часткового розупорядкування атомів монокристалічного кремнію. Однак модифікація початкової структури, як правило, призводить до інтенсифікації рекомбінаційних процесів, які збільшують темновий струм в структурі.

Теоретичні розрахунки допускають зростання коефіцієнта корисної дії на 1.5- 3% для структури з домішками Te, рівномірно розподіленими р-базі [4,5]. Важливою умовою є застосування оптичних схем, що забезпечують сотні проходів світлового потоку через сонячний елемент. В роботі [6] експериментально показано, що повна

модифікація емітерної n-області та області просторового заряду забезпечує фотогенерацію носіїв в інфрачервоній області з невисокою ефективністю. Додатковим небажаним фактором є зростання темнового струму. Як впливає з аналізу [7], ефективність фотогенерації в інфрачервоній області можна збільшити за умов коли модифікований шар створено в області просторового заряду переходу. В такій конфігурації електричне поле "розводить" носії фотогенеровані в дефектному шарі, які уникають рекомбінації та забезпечують додатковий фотострум.

На сьогоднішній день відомі також числові розрахунки структур з тонким (товщиною 10-15 нм) аморфізованим шаром, який створює додатковий потенціальний бар'єр для носіїв струму. Основним параметром таких моделей є час життя носіїв в модифікованому шарі. Можливість збільшити ефективність перетворення автори пов'язують із зменшенням темнового струму, навіть для дуже малих значень часу життя [8,9]. Очевидно, що аморфізація монокристалічного матеріалу внаслідок іонної імплантації призводить до виникнення додаткових потенціальних бар'єрів (за рахунок інтерфейсів $n-n^+$) та флуктуації ширини

забороненої зони кремнію. Тому, одночасно зі створенням модифікованого шару, суттєво змінюються умови транспорту носіїв. В запропонованій роботі проаналізовано випадок, коли тонкий аморфізований шар розміщено в області просторового заряду кремнієвого переходу та розглянуто особливості формування фотоструму в такій системі. Метою роботи є визначення параметрів модифікованого шару, які можуть забезпечити зростання густини струму короткого замикання та ефективності перетворення.

Модель

Розглянемо монокристалічний кремнієвий n - p перехід з модифікованим шаром всередині області просторового заряду. Енергетичну модель структури наведено на рис. 1. Припустимо, що аморфізований шар ($E_g = 2$ eV) з великою щільністю локальних станів в забороненій зоні, створено в деякій точці x , причому товщина його незначна порівняно з розмірами області просторового заряду $x_2 - x_1 \ll L$. Розрахуємо повну густину фотоструму.

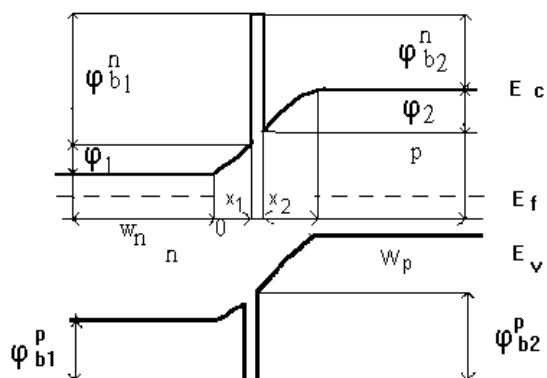


Рис. 1. Зонна діаграма p - n переходу із модифікованим в області просторового заряду.

В [3] на основі аналітичних розв'язків дифузійно-дрейфових рівнянь показано, що фотоструми n -емітера та p -бази, які виникають в результаті поглинання світла з довжиною хвилі λ , змінюються порівняно з вихідними значеннями $j_{em}^o(\lambda)$, $j_{базис}^o(\lambda)$. Вирази для цих струмів можна записати у вигляді

$$j_{em}(\lambda) = \frac{j_{em}^o(\lambda)}{1 + \frac{j_{sp}}{f_p}}, \quad j_{базис}(\lambda) = \frac{j_{базис}^o(\lambda)}{1 + \frac{j_{sn}}{f_n}} \quad (1)$$

де j_{sp} -, j_{sn} - струми насичення емітера та

бази вихідної структури.

В рамках наближень діодної теорії припускають що, носії заряду рухаються в межах області просторового заряду без зіткнень з атомами кристалічної ґратки [2], тому вплив модифікованого шару полягає в зміні співвідношення надбар'єрних потоків з емітера та бази. На основі модифікованих граничних умов можна визначити величини

$$f_p = \frac{1}{4} e v_p p_p \exp(-(\phi_2 + \phi_{b21}^p)/kT) \quad \text{та}$$

$$f_n = \frac{1}{4} e v_n n_n \exp(-(\phi_1 + \phi_{b12}^n)/kT). \quad \text{В цих формулах}$$

v_n та v_p - теплові швидкості електронів та дірок, n_n - рівноважна концентрація електронів в емітері, p_p - рівноважна концентрація дірок у базі, k - стала Больцмана, T - температура, e - заряд електрона. Потенціал в області просторового заряду шириною L для "різкого" переходу, як відомо, можна апроксимувати виразом

$$\phi = \phi_0(1 - \frac{x}{L})^2. \quad \text{Така апроксимація дозволяє}$$

визначити величини ϕ_{b1}^p , ϕ_{b2}^n для фіксованого положення модифікованого шару та величин потенціального бар'єра які він створює ϕ_{b2}^p , ϕ_{b1}^n рис. 1.

Фотогенерація електронно-діркової пари в певній точці переходу супроводжується виникненням струму тільки, якщо і електрон і дірка досягають омичних контактів. Тому, у випадку коли фотогенеровані в області просторового заряду носії "проходять" аморфізований шар або за участю локальних станів або внаслідок тунелювання (товщина шару менше 10 нм), фотострум в цій області можна наближено подати як

$$j_{онз}(\lambda) = e F(\lambda)(1 - R) \exp(-\alpha(\lambda)W_n) [1 - \exp(-\alpha(\lambda)L)], \quad (2)$$

де $F(\lambda)$ - густина потоку квантів у спектральній області $\lambda < 1200$ нм, $\alpha(\lambda)$ - коефіцієнт поглинання в кремнії, R - коефіцієнт відбиття від фронтальної поверхні.

Додатковий фотострум, пов'язаний з поглинанням у модифікованому шарі, можна розрахувати за формулою

$$j_{\delta} = F(\lambda)(1 - R)\alpha_{\delta}d, \quad (3)$$

де $F(\lambda)$ - густина потоку квантів у спектральній області $1200 \text{ нм} < \lambda < 2500 \text{ нм}$, $\alpha_{\delta}(\lambda)$ - коефіцієнт поглинання в аморфізованому шарі.

Повна густина струму короткого замикання $j_{к.з}$ є сумою чотирьох означених компонент.

Результати та їх обговорення

Розглянемо вихідну структуру з загальною густиною фотоструму $j_{к.з.} = 33 \text{ мА/см}^2$, яка формується з трьох складових: 6 мА/см^2 колектується з емітера, 22 мА/см^2 колектується з бази та 5 мА/см^2 забезпечується поглинанням в області просторового заряду. Ці значення можна отримати використовуючи аналітичні вирази [1] та апроксимацію для спектрального розподілу кількості квантів, або, безпосереднього, з аналізу просторових розподілів густини електронного та діркового фотострумів, отриманих за допомогою *PCID*. Розрахунок виконаємо для типових параметрів кремнієвих сонячних елементів: $n_n = N_D = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $p_p = N_A = 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $D_n = 30 \text{ см}^2/\text{с}$, $D_p = 13 \text{ см}^2/\text{с}$, $v_p = v_n = 10^7 \text{ см/с}$, $W_n = 0.3 \text{ мкм}$, $W_p = 100 \text{ мкм}$. Проаналізуємо, яким чином змінюється густина струму короткого замикання $j_{к.з.}$ внаслідок зміни положення модифікованого шару в умовах освітлення AM1,5.

Оцінимо чисельно додаткову величину густини фотоструму, яка виникає внаслідок поглинання інфрачервоних квантів в модифікованому шарі. Спектральний розподіл потужності сонячного випромінювання апроксимується в програмі *PCID* у вигляді набору дискретних значень. Це, в свою чергу, дозволяє отримати розподіл кількості квантів $N_i(\lambda_i)$, які падають на одиницю поверхні зразка за одиницю часу ($I_i(\lambda_i) = (hc/\lambda_i) N_i(\lambda_i)$). Беручи до уваги значення коефіцієнта поглинання в аморфному кремнії $\alpha = 10^2 \text{ см}^{-1}$ в діапазоні енергій квантів $0.5\text{-}1.1 \text{ еВ}$, для шару товщиною $d = 50 \text{ нм}$ величина фотоструму j_δ складає:

$$j_\delta = e \sum_{\lambda=1120\text{ нм}}^{\lambda=2450\text{ нм}} N(\lambda) \alpha d = 12 \text{ мкА/см}^2 \quad (4)$$

Нескладні обчислення показують, що при створенні ідеальних умов оптичного захоплення внаслідок 100 проходів світлового потоку величина густини додаткового струму складатиме 1.18 мА/см^2 .

Залежності густини фотоструму, який “збирається” з емітера та бази від положення модифікованого шару, розраховані для різних висот бар’єра, наведені на рис. 2. та рис. 3. відповідно. Як вже зазначалося, загальна густина струму короткого замикання $j_{к.з.}$ є сумою чотирьох компонент, її залежність від положення модифікованому шарі та висоти створюваного ним бар’єра ($\phi_{b2}^p = \phi_{b1}^n$) проілюстровано на рис. 4. цих розрахункових кривих можна визначити параметри модифікованого шару, необхідні для отримання

оптимальної величини густини струму короткого замикання. Так, для $\phi_{b2}^p = \phi_{b1}^n = 0.3 \text{ еВ}$ оптимальним є положення субструктури в межах від $0.2L$ до $0.6L$. У випадку збільшення висоти бар’єра цей проміжок зменшується і в граничному випадку, коли $\phi_{b2}^p = \phi_{b1}^n = 0.45 \text{ еВ}$, оптимальним буде положення шару в точці $0.3L$. Подальше зростання висоти бар’єра, як показують розрахунки, призводить до різкого зменшення струмів, які “збираються” з базової та емітерної областей. В такому випадку немає сенсу розглядати внесок додаткової фотогенерації в модифікованому шарі, оскільки ефективність перетворення вихідної структури зменшується.

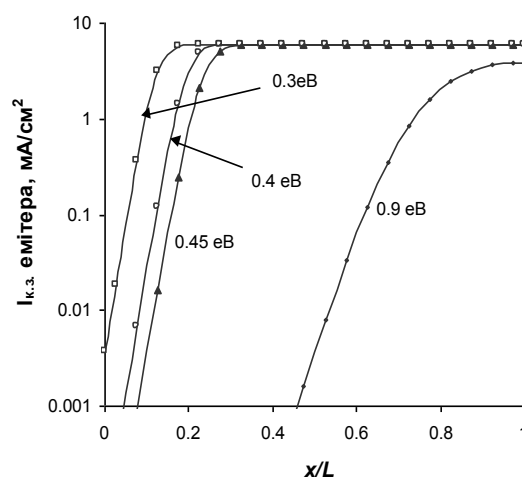


Рис. 2. Залежності густини фотоструму, який колектується з емітера від положення модифікованого шару, для різних величин ϕ_{b2}^p .

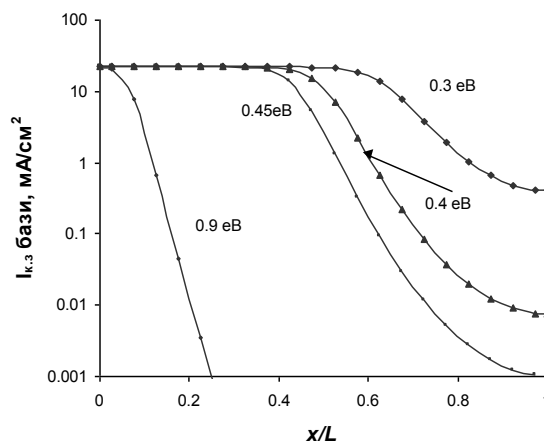


Рис. 3. Залежності густини фотоструму, який колектується з бази від положення модифікованого шару, для різних величин ϕ_{b1}^n .

Окремо розглянемо випадок, коли модифікований шар може впливати на фотострум

області просторового заряду j_{onz} . Така ситуація має місце, наприклад, у випадку низької ефективності обміну носіїв із локальними станами в модифікованому шарі. Будь яке розміщення всередині області просторового заряду $0 < x < L$, очевидно, створює умови для рекомбінаційних втрат внаслідок збирання носіїв в потенціальних “кишенях” зправа та зліва від аморфізованого шару. Можна припустити, що, за додаткової умови $\phi_{bl}^n=0$, оптимальним варіантом розміщення є точка $x=0$.

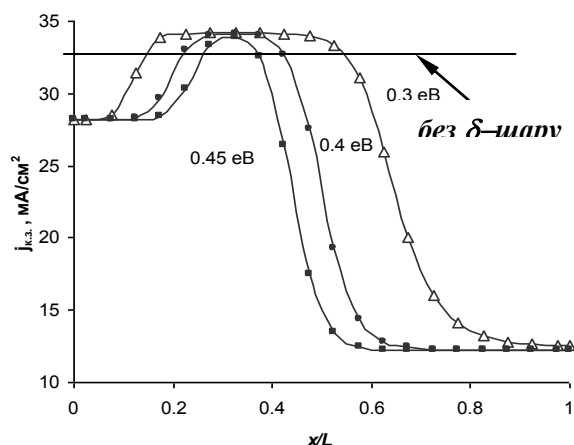


Рис.4. Залежність густини струму короткого замикання від положення δ -шару для різних висот потенціального бар'єра ϕ_{kz} , ϕ_{bl} .

Це дозволяє зберегти значення j_{onz} без змін. Навпаки, аморфізований шар в точці $x=L$ блокує дрейфовий потік дірок з області $x < L$ в p -область переходу та водночас зменшує електронний струм рис 3. Як наслідок, очікуваний внесок інфрачервоної фотогенерації може бути нівельовано. Зауважимо, що додаткові дані для аналізу означеного випадку можна отримати з допомогою числових методів, розглядаючи дифузійно-дрейфові рівняння для області просторового заряду з урахуванням параметрів модифікованого шару.

Висновки

Визначені параметри модифікованого шару (висота потенціального бар'єра, ширина, положення, коефіцієнт поглинання), які можуть забезпечити зростання ефективності фотоперетворення кремнієвих сонячних елементів на основі p - n переходу. Наприклад, для додаткового потенціального бар'єра 0.3 еВ, який створюється шаром, оптимальним є його

положення в межах від 0.2 до 0.6 ширини області просторового заряду. Зростання ефективності фотоперетворення досягається при умові, що висота потенціального бар'єра не перевищує 0.45 еВ. Ефект збільшення j_{kz} може складати 2% внаслідок додаткового поглинання квантів з енергією $h\nu < 1.12$ еВ

Список використаних джерел

1. Sze S. Physic of semiconductor device:(1984)- M.: Mir, -456p (in Russian)
2. Strikha V.I. and G.P. Peka Surface and Contact phenomena in semiconductors (1992).-K.:Lybid,-224p (in Russian)
3. Kozinetz A. V. Physical properties of silicon photodetectors with inserted delta- and psi- layers.-Manuscript. Thesis for a physical and mathematical sciences candidate's degree-2007-153 p
4. Yuan J., Shen H., Zhong F., Deng H. Impurity photovoltaic effect in silicon solar cells doped with tellurium// Optoelectronics and advanded materials, -2011- 5, N 8, - P. 866 – 869.
5. M.J. Keevers, M.A. Green Extended infrared response of silicon solar cells and the impurity photovoltaic effect // Solar Energy Materials and Solar Cells 41/42-1996- -P. 195-204
6. Keevers M.J., Saris F.W., Zhang G.C., Zhao J., Green M. A. Screening of optical dopants in silicon solar cell for improved infrared response // Proc. 13th European Photovoltaic Solar Energy Conf.-Nice-1995-P.1215-1218
7. Kasai H., Sato T., Matsumura H. Study for impurity photovoltaic effect to improve the efficiency of silicon solar cells // Proc. 14th European Photovoltaic Solar Energy Conf.-Barcelona.-1887-P.161-163
8. Kuznicki Z.T., Wu L., Grob J. J., Ventura L. Infrared absorption of a new very high efficiency Si solar cell // Proc. 12th European Photovoltaic Solar Energy Conf.-Amsterdam-1994-P.1056-1059.
9. Kuznicki Z.T., Ley M. A near-IR improvement obtained by Si structural modifications // Proc. 17th European Photovoltaic Solar Energy Conf.-Munich.-2001-P.331-334

Надійшла до редколегії 29.07.13

УДК 539-022.532

Кузнецов Г.В., д.ф.-м.н., проф., Тіщенко І.Ю.,
аспірант, Ботурчук Є.Я., аспірант.

Фізичні властивості нанопорошку, отриманого в плазмі з прекурсору SiH₄

В даній роботі описано фізичні властивості нанопорошку кремнію, отриманого за допомогою трансформаторного плазмотрона, шляхом розкладу газу моносилана. Для порівняльної оцінки якості отриманого порошку приводиться порівняння досліджуваних характеристик з характеристиками мікронного порошку промислового кремнію, що використовується при виготовленні фотоелектричних перетворювачів.

Ключові слова: Нанопорошок, кремній, імпеданс-спектроскопія, ІЧ спектроскопія з Фур'є перетворенням, Раманівський спектр.

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова
4д, e-mail: ihor.t@i.ua

G.V. Kuznetsov, Ph. D., I.Y. Tishchenko, post
graduate student, E.Y. Boturchuk, post graduate
student.

Physical properties of nanopowder obtained from SiH₄ in plasma

This article describes physical properties of silicon nanopowder, that was obtained using transformer plasma system, by SiH₄ decomposition. For the powder quality evaluation, properties of the obtained powder were compared with commercial Si powder properties, such commercial Si is used for solar cells production.

Key words: Nanopowder, silicon, impedance spectroscopy, FTIR spectroscopy, Raman spectra.

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: ihor.t@i.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Скришевський В.А.

1 Вступ

Нанокристалічний кремній (nc-Si) є формою поруватого кремнію. Це алотропна форма кремнію з паракристалічною структурою, подібною до структури аморфного кремнію. Вони відрізняються тим, що nc-Si має дуже маленькі зерна, які зосереджені в аморфній фазі. Поняття «нанокристалічний кремній» відноситься до матеріалів, що знаходяться в перехідній області між аморфним і кристалічним кремнієм.

Основне застосування такого матеріалу відноситься до тонкоплівкових ФЕП. nc-Si має таку ж ширину забороненої зони, що і в звичайного кристалічного кремнію. Його можна застосовувати для виготовлення тандемних приладів з кількома переходами.

В даній роботі розглянуто фізичні властивості нанокристалічного кремнію, отриманого шляхом розкладу SiH₄ в струмені плазми. В якості джерела плазми використовується трансформаторна плазмова система. Переваги такого типу плазмотрону в тому, що в ньому не використовуються металічні електроди, як і в ВЧ плазмотронах, що виключає

додаткове потрапляння сторонніх домішок при процесі отримання порошку.

2 Експериментальна частина

Трансформаторний плазмотрон це прилад який створює індукційні (безелектродні) низькочастотні розряди. В таких приладах для забезпечення зв'язку між первинною індукційною обмоткою і замкнутим газовим розрядом, використовується стрижень з магнітного матеріалу [1].

Принципова схема трансформаторного плазмотрона наведена на рис. 1. Первинна обмотка має 4...8 витків, живлення забезпечується за допомогою електромагнітного генератора або тиристорного перетворювача, частотою 10³...10⁴ Гц. Магнітопровід (ферит або трансформаторне залізо) зв'язує загальним магнітним ланцюгом витки первинної обмотки та тороїдальну камеру, в якій виникає плазма – вторинний виток електричної схеми. Для полегшення генерації розряду в тороїдній камері створюється форвакуум з тиском 10⁻¹...10⁻² мм рт. ст.

Газ SiH₄ використовувався в якості прекурсору для отримання нанорозмірного

порошку кремнію. SiH_4 подавався в струмінь аргонної плазми всередині тороїдальної камери. Реакція розкладу моносилану досить проста й потребує мінімальних затрат енергії для її проведення (моносилан розкладається на повітрі).

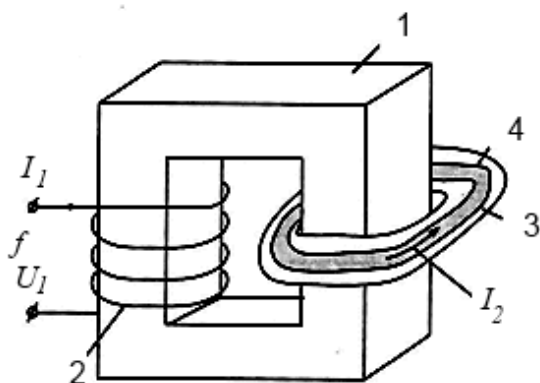
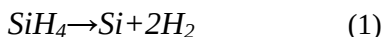


Рис. 1 Принципова схема трансформаторного плазмотрона: 1 – магнітопровід; 2 – витки первинної обмотки; 3 – тороїдальна розрядка камери; 4 – плазма трансформаторного розряду

Після проходження через плазму утворюється нанорозмірний порошок кремнію, який має високу температуру, проте не окислюється завдяки атмосфері аргону. Порошок збирається за допомогою послідовно з'єднаних циклону та рукавного фільтра. Тривимірна модель експериментальної установки приведено на рис. 2.

Для оцінки якості отриманого нанорозмірного порошку кремнію було проведено певні аналізи. Для аналізу хімічного складу і будови твердих речовин використовувалося вимір оптичного спектру поглинання в інфрачервоній області ($400-4000 \text{ см}^{-1}$). Спектроскопія повного імпедансу в рамках методу еквівалентних схем дозволяє розділити вклад в електропровідність від об'єму зерна, поверхні і міжкристалітних меж розділу. Методом імпедансної спектроскопії в єдиному експерименті можна отримати інформацію, що стосується діелектричних і транспортних властивостей поруватих матеріалів. Дослідження раманівських спектрів дозволяє отримати інформацію про хімічний склад матеріалу.

З метою отримання більш чіткого розуміння отриманих результатів, характеристики

отриманого нанорозмірного порошку були порівняні з аналогічними характеристиками для промислового кремнію сонячної якості.

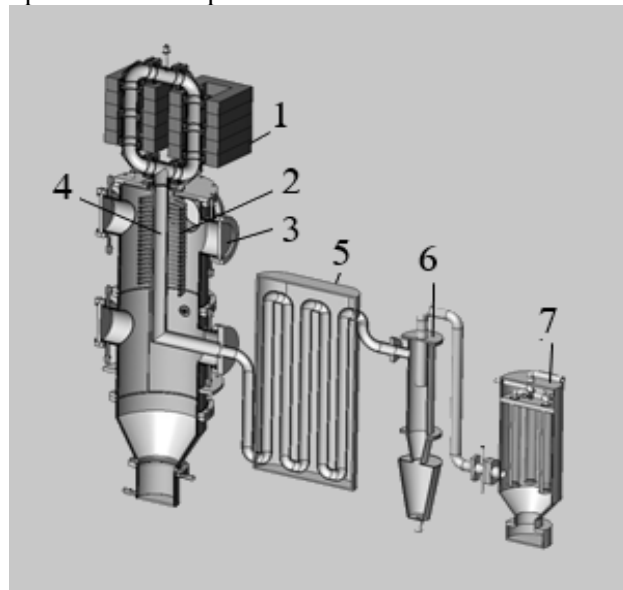


Рис. 2 Тривимірна модель експериментальної установки: 1 – Трансформаторний плазмотрон; 2 – Індуктор; 3 – Оглядове вікно; 4 – Плазмохімічний реактор; 5 – Коагулятор; 6 – Циклон; 7 – Рукавні фільтри

Згідно даних електронної мікроскопії середній розмір частинок, отриманого порошку складає 18 нм.

3 Аналіз отриманих результатів

3.1 Спектроскопія повного імпедансу

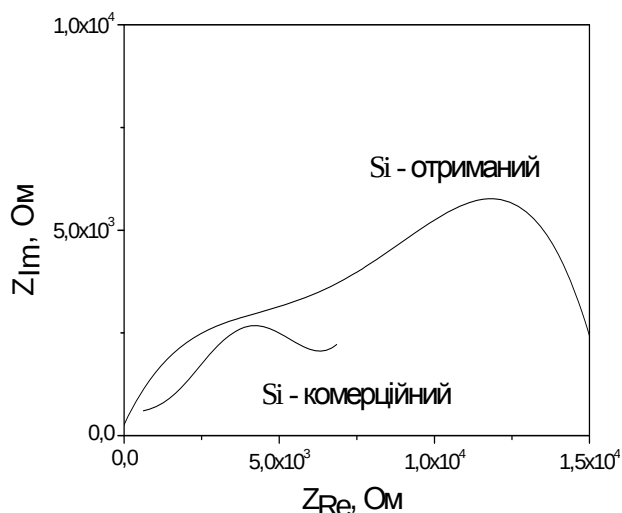


Рис. 3 Годографи повного імпедансу

На рисунку 3 наведено годографи повного імпедансу. Відсутність чітко виражених напівкіл пояснюється виводом сумарного загального комплексного опору без чіткого розділення на

границі розділу та об'єм зерна у вигляді тих же напівкіл. Відмінність напівкіл від сферичної форми пояснюється неоднорідністю кристалітів та міжзеренних проміжків.

Залежності мають схожий характер, включаючи значення рухливості носіїв у міжзеренних проміжках, а також параметри еквівалентної схеми зразків. Слід відмітити, що для об'ємного переносу заряду уявна частина опору зразку отриманого нанопорошку, краще проявляється, ніж у порівняльного порошку сонячного кремнію. Можна припустити, що транспорт в основному відбувається через міжзеренні прошарки.

3.2 ІЧ спектри пропускання

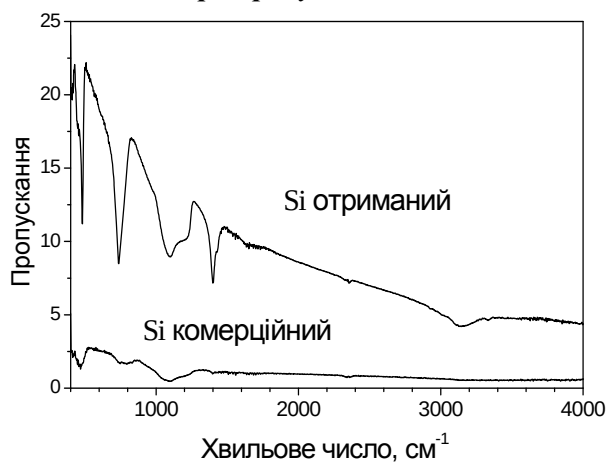


Рис. 4 ІЧ спектри пропускання

В досліджуваному діапазоні в ІЧ спектрах отриманого зразку ідентифікуються смуги поглинання: ($\lambda_1=480 \text{ см}^{-1}$, $\lambda_2=720 \text{ см}^{-1}$, $\lambda_1=1100 \text{ см}^{-1}$, $\lambda_1=1220 \text{ см}^{-1}$, $\lambda_1=1400 \text{ см}^{-1}$, $\lambda_1=1650 \text{ см}^{-1}$, $\lambda_1=2350 \text{ см}^{-1}$, $\lambda_1=3200 \text{ см}^{-1}$), які є характерними для кристалічного кремнію і обумовлені зв'язками атомів кремнію з атомами водню, кисню та гідроксильними групами ОН [2].

Коливання при 480 см^{-1} відповідають деформаційним коливанням качання структурних містків Si-O-Si [3].

Широка смуга поглинання при $1050\text{--}1250 \text{ см}^{-1}$ обумовлені поперечно-повздовжними валентними коливаннями зв'язків Si-O-Si в SiO_x ($0 < x < 2$), що свідчить про формування на поверхні нанокристалітів кремнію окислених ділянок.

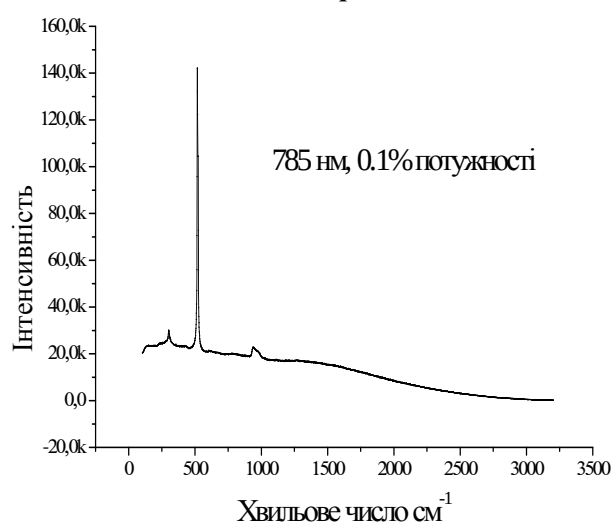
Смуги поглинання при 1400 см^{-1} та 1650 см^{-1} є характерною ознакою наявності координаційно зв'язаної гідратованої води.

Смуга поглинання при 2350 см^{-1} - повздовжніми валентними коливаннями молекул кисню й кремнію, об'єднаних в структуру типу $\text{O}_3\text{-Si}$.

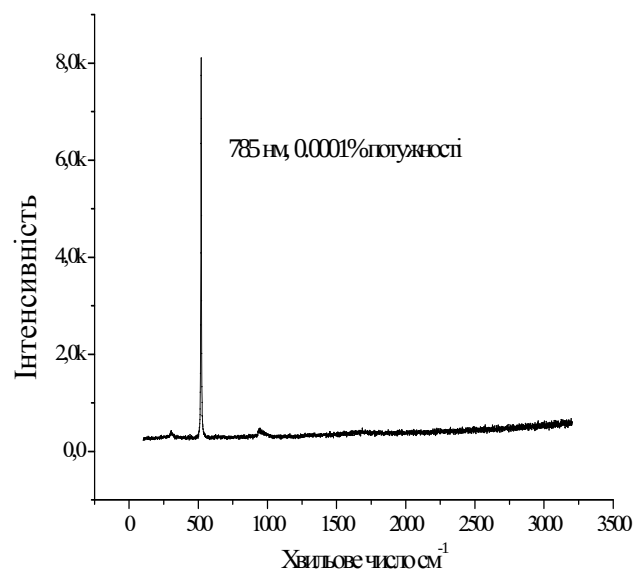
Широку смугу поглинання ($3000\text{--}3700 \text{ см}^{-1}$) зазвичай пов'язують з деформаційними коливаннями адсорбованих на поверхні кристалітів кремнію молекул води. Очевидно, що вплив водних парів атмосфери призводить до гідратації поверхні нанокристалітів кремнію і є основною причиною появи смуг поглинання гідроксильних груп О-Н та адсорбованих молекул води.

Помітну смугу поглинання на 700 см^{-1} утворюють групи SiH (маятникові коливання) і менш явну смугу на 1650 см^{-1} утворюють деформаційні коливання молекулярної адсорбованої води (у c-Si).

3.3 Раманівські спектри



а



б

Рис. 4 Раманівські спектри: а) – для отриманого нанорозмірного порошку; б) – для комерційного порошку кремнію.

Раманівські спектри для досліджуваного зразку та для порівняльного дають майже однакові результати в плані присутності на спектрах характерних піків.

В обох випадках для збудження використовувався лазер 785 нм.

Найбільш чітко вираженим є пік при 520см^{-1} , що відповідає недеформованому монокристалічному кремнію (100). Пік в області 302 см^{-1} може відповідати аморфному кремнію, для якого є характерним пік в області 300 см^{-1} , а також може належати недеформованому монокристалічному Si (100) [4]. Пік при 943 см^{-1} свідчить про присутність карбонатних аніонів [5].

4 Висновки

Аналіз отриманих результатів свідчить про ефективність методу отримання нанорозмірного кристалічного кремнію в плазмі, шляхом розкладу газоподібного моносилану. Зокрема аналіз раманівських спектрів свідчить про очевидне домінування в обох досліджуваних зразках монокристалічного Si з кристалографічною орієнтацією (100). Існує певна ймовірність присутності незначної

кількості аморфної фази кремнію в отриманому продукті.

Аналіз годографів повного імпедансу показав, що для вибраних методів синтезу отримані зразки нанокристалічного кремнію мають приблизно однакові значення об'ємного електричного опору $-1-1,5\text{ кОм}$.

В ІЧ-спектрах виявлені смуги поглинання, характерні для кристалічного кремнію і обумовлені зв'язками атомів кремнію з атомами водню, кисню та гідроксильними групами. Відмічено формування на поверхні нанокристалітів кремнію окислених ділянок.

Спектри ІЧ пропускання свідчать про велику реакційну здатність отриманого порошку кремнію, присутні піки поглинання свідчать про реакцію кремнію з молекулами, присутніми в повітрі. Така висока реакційність є характерною для нанорозмірного кремнію.

Присутність слідів вуглецю може бути викликана специфікою пробоподготовки, або ж реакцією з вуглецевими речовинами в повітрі.

Раманівські спектри свідчать про присутність саме кристалічного кремнію в кінцевому продукті, а не аморфного.

Список використаних джерел

1. Cherednichenko V.S., Anshakov A.S., Kuzmin M.G. Plasma electrotechnical devices.— Novosibirsk: NGTU, 2011.— 423 p. (in Russian)
2. Skryshevskiy V.A., Tolstoy V.P., Chernyshova I. Handbook of Infrared Spectroscopy of Ultrathin Films.— N.J.: John Wiley, 2003.— 710 p.
3. Karlash A.Y., Kuznetsov G.V., Litvinenko S.V., Milovanov Y.S., Skryshevskiy V.A. Influence of dynamic absorbance regime on the impedance of the composite structures with porous Si // Physics and technics of semiconductors.— 2010.— **44**.— N 10.— P 1387-1393. (in Russian)
4. Maha M Khayat, Godsway K Banini, David G Hasko, M Munawar Chaudhri Raman microscopy investigations of structural phase transformations in crystalline and amorphous silicon due to indentation with a Vickers diamond at room temperature and at 77K // Journal of physics D: Applied Physics.— **36**.— 2003.— P 1300-1307.
5. Bocchini S., Morlat-Therias S., Gardette J.L., Camino G. Influence of nanodispersed hydrotalcite on polypropylene photooxidation // European Polymer Journal.— 2008.— P 3473-3481.

Надійшла до редколегії 20.09.13

УДК 535.5:621.029.7

Слінченко Ю.А.¹, к. ф.-м. н.

Використання рівняння Гельмгольца дробового порядку для опису поширення електромагнітного випромінювання у оптичних хвилеводах

Показано, що за допомогою рівняння Гельмгольца дробового порядку можна описувати поширення електромагнітного випромінювання у оптичних хвилеводах. Такий підхід дозволяє математично адекватно та фізично замкнено враховувати дисипативні, поляризаційні та когерентні процеси у хвилеводних середовищах.

Ключові слова: рівняння Гельмгольца дробового порядку, електромагнітне випромінювання, оптичний хвильовід.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр.-т. Глушкова 4г,
e-mail: yas@univ.kiev.ua.

Slinchenko Y.A.¹, Ph.D.

Using the Helmholtz equation of fractional order to describe the propagation of electromagnetic radiation in the optical waveguides

It is shown possible to describe the propagation of electromagnetic radiation in the optical waveguides by using the Helmholtz equation of fractional order. The approach allows considering the dissipative, polarizational and coherent processes in waveguide environments mathematically adequately and physically closed.

Key Words: Helmholtz equation of fractional order, electromagnetic radiation, the optical waveguide.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4g,
e-mail: yas@univ.kiev.ua.

Статтю представив проф., д. ф.-м. н. Данилов В. В.

Вступ

Для опису різних фізичних процесів часто використовуються методи дробового інтегродиференціювання [1]. Зокрема, за допомогою таких підходів розглядається багато електродинамічних задач, пов'язаних з поширенням електромагнітного випромінювання. Наприклад, в роботі [4] вивчаються поляризаційні властивості дробових електричних і магнітних полів, у [5] досліджується поширення НВЧ-хвиль у прямокутних хвилеводах, в роботі [6] за допомогою дробового хвильового рівняння проведено теоретичне та експериментальне обґрунтування фрактальності поширення електромагнітного випромінювання у різних поглинаючих та диспергуючих середовищах.

У даній роботі за допомогою рівняння Гельмгольца дробового порядку досліджується поширення електромагнітного випромінювання у волоконних світловодах (ВС) зі профілем показника заломлення (ППЗ) типу "сходінка" (однак, цей метод можливо поширити і на випадок довільного ППЗ). При цьому використовується диференційне рівняння

Гельмгольца з дробовою похідною Рімана – Ліувілля [1] тільки уздовж напрямку поширення електромагнітного випромінювання (вісі z).

Теорія

Розглянемо опис поширення електромагнітного випромінювання у ВС за допомогою рівняння Гельмгольца дробового порядку.

У результаті узагальнення звичайного рівняння Гельмгольца [2] отримаємо наступне дробове рівняння Гельмгольца для поздовжньої складової електричного поля $E_{z0j}(\rho, \eta)$ (для зручності будуть розглядатися лише вісесиметричні TM_{0j} -моди)

$$\left[\Delta_{\rho} + \frac{1}{l^2} D_{\eta}^{\alpha} + n(\rho)^2 k^2 \right] E_{z0j}(\vec{\rho}, \eta) = 0, \quad (1)$$

де $\Delta_{\rho} = \partial(\rho \partial / \partial \rho) / \rho \partial \rho$,

$${}_0D_{\eta}^{\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \frac{d^2}{dx^2} \int_0^x \frac{f(y)dy}{(x-y)^{\alpha-1}} - \text{дробова}$$

похідна Римана-Ліувілля порядку α

($1 < \alpha \leq 2$) [1], $k = \omega/c$, $\eta = z/l$, l - довжина хвилевого середовища. При цьому функцію $n(\rho)$ для показника заломлення (ПЗ) задаємо у вигляді

$$n(\rho) = n_1 \theta(a - \rho) + n_2 \theta(\rho - a), \quad (2)$$

де a - радіус серцевини, n_1 - ПЗ серцевини, n_2 - ПЗ оболонки, $\theta(x)$ - сходинова функція Хевісайда, відповідно дослідження проводимо на прикладі ВС з сходиновим ППЗ.

Далі рівняння (1) розв'язуємо методом розділення змінних, тобто представляємо електричне поле у вигляді $E_{z0j}(\rho, \eta) = e_{z0j}(\rho) \zeta_j(\eta)$ і з урахуванням (2) знаходимо рівняння для поздовжньої компоненти електричного поля всередині серцевини

$$(a^2 \Delta_{\rho} + U_j^2) e_{z0j}^{(1)}(\rho) = 0, \quad (3)$$

(де $U_j = a(k^2 n_1^2 - \beta_j^2)^{1/2}$ - безрозмірний параметр моди в серцевині ВС, β_j - постійна поширення або власне значення j -ї моди) та у оболонці

$$(a^2 \Delta_{\rho} - W_j^2) e_{z0j}^{(2)}(\rho) = 0, \quad (4)$$

де $W_j = a(\beta_j^2 - k^2 n_2^2)^{1/2}$ безрозмірний параметр моди у оболонці ВС. При цьому приходимо до наступної задачі Коші для функції $\zeta(\eta)$

$$\begin{aligned} {}_0D_{\eta}^{\alpha} \zeta_j(\eta) + \beta_j^2 l^2 \zeta_j(\eta) &= 0, \\ {}_0D_{\eta}^{\alpha-1} \zeta_j(0) &= i\beta_j l, \\ {}_0D_{\eta}^{\alpha-2} \zeta_j(0) &= 1 \end{aligned} \quad (5)$$

Тут початкові умови узгоджені з початковими умовами, що впливають з фундаментального розв'язку $\zeta_j(\eta) = \exp(i\beta_j l \eta)$ рівняння (1) при $\gamma = 2$.

Розв'язки рівнянь (3) та (4) для ВС детально аналізуються у [2], а розв'язок (5), як впливає з [1], записується у вигляді

$$\zeta_j(\eta) = i\beta_j l \eta^{\alpha-1} E_{\alpha, \alpha}(-\beta_j^2 l^2 \eta^{\alpha}) + \eta^{\alpha-2} E_{\alpha, \alpha-1}(-\beta_j^2 l^2 \eta^{\alpha}), \quad (6)$$

де $E_{\alpha, \sigma}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(\alpha k + \sigma)}$ - функція Міттаг-

Леффлера [1]. Легко показати, що розв'язок (6) при $\gamma \rightarrow 2$ зводиться до функції $\zeta_j(\eta) = \exp(i\beta_j l \eta)$. При цьому, як зазначено у роботі [6], необхідно надалі користуватися не розв'язком (6), а функцією

$$f_j(\eta) = {}_0D_{\eta}^{\alpha-2} \zeta_j(\eta) = i\beta_j l \eta E_{\alpha, 2}(-\beta_j^2 l^2 \eta^{\alpha}) + E_{\alpha, 1}(-\beta_j^2 l^2 \eta^{\alpha}), \quad (7)$$

Разом з тим легко показати, що функція (7) є розв'язком наступної задачі Коші

$$\begin{aligned} {}_0^C D_{\eta}^{\alpha} f_j(\eta) + \beta_j^2 l^2 f_j(\eta) &= 0 \\ f_j'(0) &= i\beta_j l \\ f_j(0) &= 1 \end{aligned} \quad (8)$$

де ${}_0^C D_x^{\alpha}$ - оператор дробової похідної Капуто, дія якого на довільну функцію $f(x)$ записується у вигляді [7]

$$\begin{aligned} {}_0^C D_x^{\alpha} f(x) &= I_x^{2-\alpha} {}_0 D_x^2 f(x) = \\ &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \int_0^x \frac{dy}{(x-y)^{\alpha-1}} \frac{d^2 f(y)}{dy^2} = \\ &= {}_0 D_x^{\alpha} f(x) - \frac{f(0)}{x^{\alpha} \Gamma(1-\alpha)} - \frac{f'(0)}{x^{\alpha-1} \Gamma(2-\alpha)} \end{aligned} \quad (9)$$

Таким чином, об'єднуючи розв'язки рівнянь (3) та (4) з (7), отримуємо наступний вираз для j -ї моди поздовжньої компоненти електричного поля

$$E_{z0j}(\rho, \eta) = [AJ_0 \left(U_j \frac{\rho}{a} \right) \theta(a - \rho) + \\ + BK_0 \left(W_j \frac{\rho}{a} \right) \theta(\rho - a)] \cdot [i\beta_j l \eta E_{\alpha,2} \cdot, \quad (10) \\ \cdot (-\beta_j^2 l^2 \eta^\alpha) + E_{\alpha,1}(-\beta_j^2 l^2 \eta^\alpha)]$$

де A, B - деякі сталі, $J_0(x)$ та $K_0(x)$ - відповідно функції Бесселя та Макдональда нульового порядку. Використовуючи (10), розраховуємо ненульові у цьому випадку поперечні компоненти електричного $E_{\rho 0j}$ та

магнітного $H_{\varphi 0j}$ полів у відповідності з формулами $E_\rho = \frac{i\beta}{p} \frac{\partial E_z}{\partial \rho}$ та

$$H_\varphi = \frac{ikn^2}{p} \left(\frac{\varepsilon_0}{\mu_0} \right)^{1/2} \frac{\partial E_z}{\partial \rho}, \quad \text{де } p = k^2 n^2 - \beta^2, \quad \text{а}$$

ε_0 та μ_0 - відповідно електрична та магнітна проникність вільного простору [2]. Потім з умов неперервності мод E_{z0j} та $H_{\varphi 0j}$ при $\rho = a$ отримуємо наступне характеристичне рівняння [2]

$$\frac{n_1^2 J_1(U)}{U J_0(U)} + \frac{n_2^2 K_1(W)}{W K_0(W)} = 0, \quad (11)$$

де $J_1(x)$ та $K_1(x)$ - відповідно функції Бесселя та Макдональда першого порядку.

Графічний розв'язок рівняння (11) для значень $n_1 = 1,5$, $n_2 = 1$, $a = 1 \text{ мкм}$ та $\lambda = 1,55 \text{ мкм}$ наведено на рис. 1, де

$$F(\beta) = \frac{n_1^2 J_1[U(\beta)]}{U(\beta) J_0[U(\beta)]} + \frac{n_2^2 K_1[W(\beta)]}{W(\beta) K_0[W(\beta)]}.$$

У цьому випадку існують дві моди з постійними поширення $\beta_1 \approx 5,074 \text{ мкм}^{-1}$ та

$\beta_2 \approx 5,585 \text{ мкм}^{-1}$ (на рис.1 вони схематично позначені чорними кружками). Потужність випромінювання, що поширюється по ВС, для кожної з цих мод можна розрахувати [2]

$$P_{0j}(\eta) = \frac{c}{8\pi} \text{Re} \left\{ \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty \rho d\rho E_{\rho 0j} H_{\varphi 0j}^* \right\}. \quad (12)$$

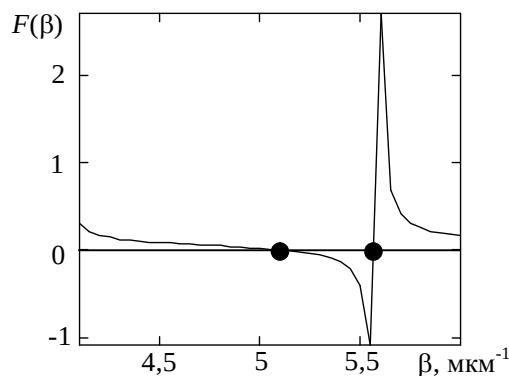


Рис. 1. Графік функції $F(\beta)$.

І, нарешті, на основі виразу (12) можна ввести функцію згущання

$$L_{0j}(\eta) = -10 \lg \left(\frac{P_{0j}(\eta)}{P_{0j}(0)} \right) = -20 \lg |f_j(\eta)|, \quad (13)$$

яка вимірюється у дБ/км.

Дослідимо тепер залежність (13) для ВС довжиною $l = 1 \text{ км}$ та з параметрами наведеними вище. При цьому необхідно скористатися необхідним у даному випадку асимптотичним (при $|z| \gg 1$) виразом для функції Міттаг-Леффлера [3]

$$E_{\alpha, \sigma}(z) = \frac{z^{(1-\sigma)/\alpha}}{\alpha} \exp(z^{1/\alpha}) - \\ - \sum_{k=1}^p \frac{z^{-k}}{\Gamma(\sigma - \alpha k)} + O(|z|^{-1-p}).$$

При припущенні, що згущання для такого ВС не повинно перевищувати значення $0,1 \text{ дБ/км}$ для обох існуючих мод, отримуємо наступну величину для показника дробової похідної Капуто $\alpha = 2 - 10^{-12}$. Для цього значення на рис.2 суцільною лінією зображено графік функції (13) для першої моди (з β_1), а пунктирною - для другої моди (з β_2).

Таким чином, в залежності від значень фізичних та геометричних параметрів ВС може реалізовуватися як одномодовий, так і багатомодовий режими поширення поширення електромагнітного випромінювання. При цьому за допомогою формули (11) для кожної моди визначаються сталі поширення, а з допомогою виразу (13) аналізується процес згущання кожної

моди. Потрібно також зазначити, що на відміну від врахування затухання при традиційному підході, коли виконується лише штучна заміна дійсних постійних поширення β_j на комплексні величини $\beta_j = \beta'_j + i\beta''_j$, з допомогою дробового інтегро-диференціювання затухання описується природнім шляхом на основі розв'язку дробового рівняння Гельмгольца (1).

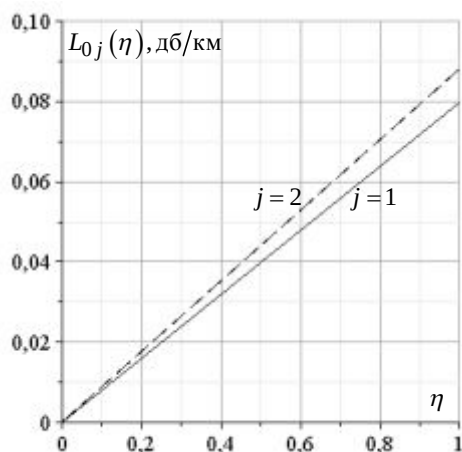


Рис. 2. Графіки функцій затухання $L_{0j}(\eta) = -20 \lg |f_j(\eta)|$ відповідно для першої ($j=1$) та другої ($j=2$) мод, що виникають при поширенні електромагнітного випромінювання з

$\lambda = 1,55 \text{ мкм}$ у світловоді з східчастим профілем показника заломлення з параметрами $n_1 = 1,5$, $n_2 = 1$ та $a = 1 \text{ мкм}$.

Висновки

Таким чином, в роботі виконано послідовний опис ВС зі східчастим ППЗ за допомогою дробового інтегро-диференціювання, тобто наведено розв'язок рівняння Гельмгольца з дробовою похідною вздовж вісі z для вісесиметричних TM_{0j} -мод, розв'язане характеристичне рівняння для конкретного випадку, досліджено затухання потужності випромінювання мод, що виникають.

Слід зазначити, що апарат дробового інтегро-диференціювання дозволяє адекватно описувати і більш складні волоконні структури, досліджуючи при цьому не лише процеси дисипації, але й різноманітні поляризаційні і когерентні ефекти. При цьому, природно необхідно використовувати дробові похідні не тільки вздовж напрямку поширення випромінювання, а й для змінних ρ та φ .

Список використаних джерел

1. Samko S. G. Integrals and derivatives of fraction order and some their approximations / S. G. Samko, A. A. Kilbas, O. I. Marichev. – Minsk: Science and technics, 1987. – 688 p. (in Russian).
2. Snyder A. Optical waveguide theory / A. Snyder, J. Love. – Moscow : Radio and communication, 1987. – 656 p. (in Russian).
3. Drjbashan M. M. Integral transforms and representations of functions in the complex domain / Drjbashan M. M. – Moscow : Science, 1966. – 672 p. (in Russian).
4. Ivahnichenko M. V. The polarization properties of fractional fields / M. V. Ivahnichenko // Radiophysics and electronics. – 2007. – 12, № 2. – P. 328–334. (in Russian).
5. Hussain A. Fractional curl operator and fractional waveguides / A. Hussain, S. Ishfaq, Q. A. Naqvi // PIER. – 2006. – 63. – P. 319–355.
6. Maksyuta N. V. Theoretical and experimental justification for the fractal distribution of electromagnetic radiation / N. V. Maksyuta, O. I. Barchuk, T. V. Rodionova, L. N. Maksyuta // Surface. – 2008. – № 4. – P. 1–7. (in Russian).
7. Caputo M. Linear models of dissipation in inelastic solids / M. Caputo, F. Mainardi // inelastic solids. Riv Nuovo Cimento. – 1971. – II, № 1. – P. 161–198.

Надійшла до редколегії 13.07.13

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 532.536

Альошин О.Д.¹, д.ф.-м. н., проф.
Білоус О.І.², к.ф.-м. н., доц.

Малі критичні показники α_t , α_μ , η критичного флюїду і їх фізична основа

В роботі проведено аналіз величин малих критичних показників α_t , α_μ , η флуктуаційної теорії фазових переходів (ФТФП) визначених на основі різноманітних теоретичних підходів: методів ε -розкладу, ренормгрупових перетворень (РГ), підсумовування рядів, метода І.І.Новікова на основі термодинамічного потенціала Гіббса. Запропоновано новий метод розрахунку величин критичних показників шляхом введення малих параметрів в рівняння ФТФП.

Виходячи з того, що ці малі параметри являють собою малі різниці між величинами критичних показників ФТФП та відповідними показниками метода І.І.Новікова, визначено фізичний зміст малих критичних показників. Не нульові значення малих параметрів та відповідних малих критичних показників ФТФП свідчать про наявність в системі великомасштабних флуктуацій параметра порядку.

Ключові слова: флуктуаційна теорія, критичні показники, метод ε -розкладів, метод малого параметру, π -метод

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, веб сайт: <http://criticalfluid.com.ua/>
e-mail: alekhin@univ.kiev.ua,

² Національний авіаційний університет, 02058, м.Київ, пр-т Комарова, 1,
e-mail: ²o_bilous@ua.fm

Alekhin A.D.¹, Sci.Dr., Prof.
Bilous O.I.², Ph.D.

Small critical exponents α_t , α_μ , η critical fluid and their physical basis

In this paper the analysis has been performed for the small quantities of critical parameters in the fluctuation theory of phase transitions (FTFP) when they are defined on the basis of various theoretical approaches as the methods of ε -schedule, renormalized group transformations (RG), summation of series, and method by I. I. Novikov based on the Gibbs thermodynamic potential. A new method of the critical exponents values calculation is proposed by introducing of the small parameters in the FTFP equation.

Using the fact that these small parameters present the small differences between the values of critical exponents FTFP and relevant indicators of I. I. Novikov method, the physical sense of small critical exponents has been defined. Non-zero values of small parameters as well as corresponding small critical exponents FTFP indicate about the presence of large-scale fluctuations of the order parameter in the system under consideration.

Key Words: fluctuation theory, critical parameters, the method ε -scheduling, the method of small parameter, π -method

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
веб сайт: <http://criticalfluid.com.ua/>
e-mail: alekhin@univ.kiev.ua,

² National Aviation University, 1 Kosmonavta Komarova Avenue, k.1, Kyiv, 02058 Ukraine
e-mail: ²o_bilous@ua.fm

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

На даний час значно зріс інтерес до вивчення різноманітних властивостей критичних флюїдів, обумовлений їх широким практичним застосуванням в новітніх технологіях [1-3]. Відповідно до цього, дослідники критичного стану речовини все частіше звертаються до більш ретельного визначення величин критичних показників флуктуаційної теорії фазових переходів (ФТФП) [4-6], які є одними з основних параметрів рівняння стану речовини поблизу

критичної точки (КТ). В рамках цього напрямку досліджень в роботах [7, 8] додатково до відомих методів [4-6] визначення критичних показників запропоновано новий метод їх визначення оснований на введенні в рівняння ФТФП малих параметрів. В роботах [9, 10] проведено порівняльний аналіз одержаних в [7, 8] результатів з різними теоретичними підходами [4-6]: методів ε -розкладу, ренормгрупових перетворень (РГ), підсумовування рядів. В цьому

порівняльному аналізі були використані також результати метода І.І.Новікова [11] на основі термодинамічного потенціалу Гіббса та його похідних поблизу критичної точки.

Цей аналіз показав, що величини критичних показників, що отримані в [4-6] і [11] на підставі різних методів, можна умовно розділити на дві групи: відносно великі $\delta \gg \gamma > v > \xi > \beta$ та відносно малі $\alpha_t > \alpha_\mu \approx \eta < < \beta$. В різних теоретичних підходах [4-6] та [11], величини великих КП: $\delta, \gamma, v, \xi, \beta$ відрізняються між собою в межах (5-10)%. Ця розбіжність між величинами критичних показників є близькою до реальних похибок експерименту поблизу критичної точки. Величини ж малих КП: $\alpha_t, \alpha_\mu, \eta$ в цих двох підходах відрізняються навіть якісно. Так, згідно [11] ці малі критичні показники набувають нульових значень ($\alpha_t = \alpha_\mu = \eta = 0$). Виходячи ж з ФТФП [4-6] малі критичні показники відрізняються від нуля ($\alpha_t > 0, \alpha_\mu > 0, \eta > 0$). При цьому, абсолютні величини малих критичних показників α_t та η [4-6], в різних теоретичних підходах, відрізняються між собою в межах (20-30)% та більше. Ця розбіжність в величинах критичних показників значно перевищує похибки експерименту. Величина ж критичних показників польової залежності теплоємності α_μ ($C_v \sim \Delta \mu^{-\alpha_\mu}$), в даний час, в науковій літературі взагалі не приводиться.

В зв'язку з цим об'єктивно не можна віддати перевагу тому чи іншому їх значенню чи способу їх визначення [4-6]. Це пов'язано з тим, що в самій ФТФП їх величини не визначені. В [4-6] представлено тільки шість рівнянь, які пов'язують між собою для трьохмірних систем ($d=3$) вісім критичних показників.

$$\begin{aligned} \beta &= 3v - v/\xi & \gamma &= 2v/\xi - 3v \\ \delta &= 1/(3\xi - 1) & \alpha_t &= 2 - 3v \\ \alpha_\mu &= 2\xi/v - 3\xi & \eta &= 5 - 2/\xi \end{aligned} \quad (1)$$

Ясно, що на основі шести рівнянь (1) не можливо визначити істинні значення восьми критичних показників. Однак з цих рівнянь слідує ряд фундаментальних нерівностей, з яких все ж можна оцінити величини КП:

$$\begin{aligned} \alpha_t &> 0, \alpha_\mu > 0, \eta > 0, \\ v < v^* &= 2/3, \xi > \xi^* &= 2/5 \\ \delta < \delta^* &= 5, \gamma < \gamma^* &= 4/3, \beta \neq \beta^* &= 1/3 \end{aligned} \quad (2)$$

Як видно з (2) величини параметрів $v^*, \xi^*, \delta^*, \gamma^*, \beta^*$ збігаються з величинами критичних

показників отриманих академіком І.І.Новіковим [11], на основі використання термодинамічного потенціалу Гіббса поблизу критичної точки.

Саме ці нерівності (2), в роботах [7, 8], були покладені в основу нового методу визначення критичних показників. Запропонований метод полягає у введенні в фундаментальні співвідношення (1) ФТФП малих параметрів, які на основі нерівності (2), мають вигляд:

$$\begin{aligned} v_0 &= 2/3 - v < < v; \xi_0 = \xi - 2/5 < < \xi; \\ \delta_0 &= 5 - \delta < < \delta, \gamma_0 = 4/3 - \gamma < < \gamma; \\ |\beta_0| &= |\beta - 1/3| < < \beta; \end{aligned} \quad (3)$$

Як видно з (3) введенні в [7, 8] малі параметри є малі різниці між величинами критичних показників ФТФП [4-6] та відповідними критичними показниками, які сліднують з метода І.І.Новікова [11]. Тому ці малі параметри мають фізичну основу пов'язану з флуктуаційними характеристиками системи поблизу КТ.

Використовуючи результати експериментальних [12, 13] та теоретичних [4-6] досліджень величини малих критичних показників і малих параметрів [7, 8] можна представити у вигляді:

$$\delta_0 \gg \gamma_0 \approx \alpha_t > \alpha_\mu \approx \eta > v_0 \gg \xi_0 \approx |\beta_0| = (4 \div 5) \cdot 10^{-3} \quad (4)$$

Умова (4) дозволяє запропонувати на основі (1)-(3) ряд нових важливих співвідношень між малими критичними показниками $\alpha_t, \alpha_\mu, \eta$ та малими параметрами v_0, ξ_0 :

$$\begin{aligned} \alpha_t &= 3v_0; \\ \alpha_\mu &= 9/5 v_0 (1 + 3/2 v_0 + 5/2 \xi_0 + 15/4 v_0 \xi_0) = \\ &= (57/5) \xi_0 (1 + 12 \xi_0); \\ \eta &= (25/2) \xi_0 (1 - 5/2 \xi_0); \\ \beta_0 &= 25/6 \xi_0 - v_0/2 = \xi_0; v_0 = 19/3 \xi_0 \end{aligned} \quad (5)$$

Виходячи з представлених вище співвідношень (1)-(5) між малими критичними показниками та малими параметрами, можна запропонувати два нових співвідношення між критичними показниками радіуса кореляції v, ξ з абсолютною похибкою порядку 10^{-3}

$$\xi - \beta = \xi - 3v + v/\xi = 1/15 \pm 10^{-3} \quad (6)$$

$$\xi = v^2 (1 \pm 10^{-3}) \quad (7)$$

Коренями цих рівнянь є значення: $v = 0,636 \pm 0,001, \xi = 0,405 \pm 0,001$.

Графічне рішення цих рівнянь показано на рис. 1.

Співвідношення (6)-(7) можна використати для знаходження величин малих параметрів v_0 , ξ_0 за допомогою рівнянь:

$$v_0 = 19/3 \xi_0 (1 - 16 \xi_0) \quad (8)$$

$$\xi_0 = v_0^2 - 4/3 v_0 + 2/45 \quad (9)$$

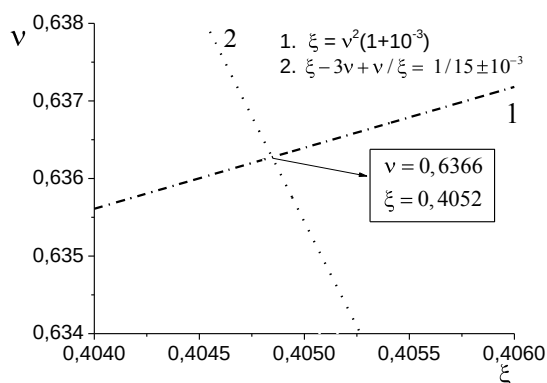


Рис. 1. Графічний розв'язок рівнянь (6), (7)

Рішення цих рівнянь дає значення $v_0 = 0,03 \pm 0,001$, $\xi_0 = 0,005 \pm 0,001$.

Графічне рішення цих рівнянь показано на рис.2

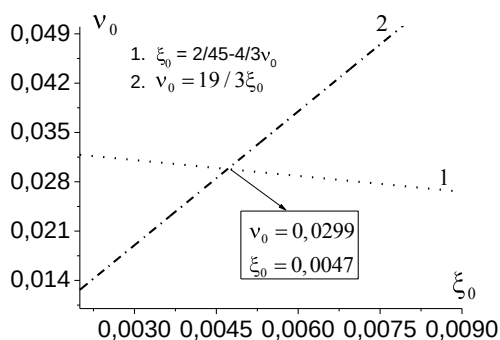


Рис. 2. Графічний розв'язок рівнянь (8), (9).

Як бачимо похибки розрахунків цих величин критичних показників v і ξ та малих параметрів v_0 , ξ_0 за допомогою представлених співвідношень (6)-(9), значно нижче похибок існуючих експериментальних даних [12, 13] та теоретичних підходів [4-6].

В подальшому, використовуючи одержані значення критичних показників радіуса кореляції: v і ξ і малих параметрів v_0 і ξ_0 на основі співвідношень (1) та (5) знайдено величини малих критичних показників: температурної залежності теплоємності $\alpha_t = 3v_0 = 0,09$, критичного показника польової залежності теплоємності $\alpha_\mu = (57/5)\xi_0(1 + 12\xi_0) = 0,058$, критичного показника кореляційної функції $\eta = (25/2)\xi_0(1 - 5/2\xi_0) = 0,061$. Вперше показано, що ця величина майже дорівнює величині критичного показника

теплоємності $\eta = 0,061 \approx \alpha_\mu = 0,058$. Слід наголосити, що одержані значення критичних показників v , ξ , α_t , α_μ повністю задовольняють фундаментальним співвідношенням ФТФП [4-6]: $\frac{\alpha_t}{\alpha_\mu} = 1.569 = \frac{v}{\xi} = 1.570$.

Як бачимо розбіжність в цих відношеннях становить величину 10^{-3} . Тобто цей результат свідчить про близькість одержаних величин критичних показників v , ξ , α_t , α_μ до їх істинних значень, що задовольняють фундаментальним рівнянням (1) ФТФП.

В той же час слід відмітити, що в науковій літературі [4-6, 12, 13] існує суттєва розбіжність в значеннях величин малих критичних показників. Зокрема, показник температурної залежності теплоємності змінюється в межах $\alpha_t = (0,08 \div 0,12)$. Величина малого критичного показника кореляційної функції змінюється в межах величин $\eta = (0,03 \div 0,06)$. Тому, одержані в роботі величини критичних показників теплоємності $\alpha_t = 0,09$ та кореляційної функції $\eta = 0,061$ дозволяють уточнити істинні значення цих величин.

Інформація про величину критичного показника польової залежності теплоємності α_μ на даний час не визначалась ні експериментально, ні теоретично. Отже, нами вперше одержана і представлена величина критичного показника польової залежності теплоємності $\alpha_\mu = 0,058$.

Вище в (5) були представлені співвідношення між малими критичними показниками α_t , α_μ , η та малими параметрами v_0 та ξ_0 . В подальшому, на основі цих співвідношень знайдена прямий взємозв'язок між критичними показниками теплоємності $\alpha_t = 3v_0 = 19 \xi_0 = 38/25 \eta$, $\alpha_\mu = 9/5 v_0 = 34/3 \xi_0 = 68/75 \eta$ та кореляційною функцією $\eta = 5 - 5/\xi = (25/2)\xi_0 + (25/2)^2 \xi_0^2$. Графічно ці залежності $\alpha_t(\eta)$, $\alpha_\mu(\eta)$ показані на рис. 3.

Із цих співвідношень та рис.3 випливає важливий результат, що у випадку $\eta = 0$ ($\xi_0 = 0$) величини критичних показників α_t та α_μ також приймають нульові значення ($\alpha_t = 0$, $\alpha_\mu = 0$). Тобто при $\eta = 0$ теплоємність речовини $C_v \sim t^{-\alpha_t}$ та $C_v \sim \Delta\mu^{-\alpha_\mu}$ [1] не мають степеневі розбіжності в критичній точці. Таким чином, використання нульового значення критичного показника η у флуктуаційній області ($\eta = 0$), призводить до того, що теплоємність системи поблизу критичної точки набуває скінченного значення, або визначається її логарифмічними залежностями: $C_v \sim \ln t$, $C_v \sim \ln \Delta\mu$ [4-6].

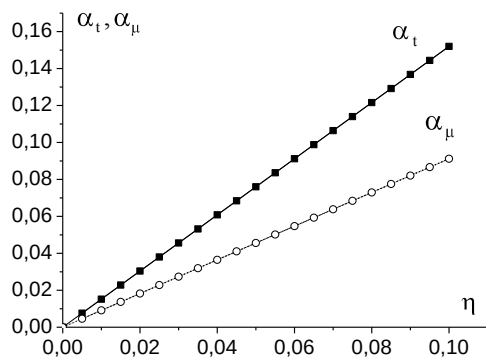


Рис. 3. Взаємозв'язок критичних показників теплоємності α_t , α_μ з критичним показником кореляційної функції η

В той же час, за умови $\alpha_t=0$, $\alpha_\mu=0$, $\eta=0$ ($\xi_0=0$ та $\nu_0=0$) величини всіх інших критичних показників ФТФП [4–6] для трьохмірних систем набувають значень $\delta=5$, $\gamma=4/3$, $\nu=2/3$, $\xi=2/5$, $\beta=1/3$, які відповідають критичним показникам, що отримані на основі метода І.І.Новікова [11].

На основі проведених досліджень можна зробити ряд висновків:

1. В роботі методом введення малого параметра в співвідношення ФТФП [4–6] вперше розрахована величина критичного показника польової залежності теплоємності $\alpha_\mu=0,058\pm0,001$ ($C_v\sim\Delta\mu^{-\alpha_\mu}$), яка майже збігається з величиною критичного показника кореляційної функції $\alpha_\mu=0.058\leq\eta=0,061$.

2. Розраховані величини критичних показників теплоємності $\alpha_t=0,09\pm0,001$, $\alpha_\mu=0,058\pm0,001$ дозволили вперше перевірити фундаментальне співвідношення ФТФП $\frac{\alpha_t}{\alpha_\mu}=1.569=\frac{\nu}{\xi}=1.570$.

3. Використання критичних показників $\nu=0.636$, $\alpha_t=0.09$, $\alpha_\mu=0.058$, $\xi=0,405$ дозволило на основі фундаментального співвідношення ФТФП $\beta+\nu/\xi+\alpha_t=2$ показати, що величина критичного показника кривої співіснування $\beta=0.339>1/3$.

4. На основі прямого зв'язку між малими параметрами і малими критичними показниками (5) вперше показано, що нульові значення малих параметрів ($\nu_0=\xi_0=0$) і відповідно малих критичних показників ($\alpha_t=\alpha_\mu=\eta=0$) приводять до логарифмічної особливості поведінки польової та температурної залежності теплоємності ($C_v\sim\ln t$, $C_v\sim\ln \Delta\mu$).

5. Виходячи з того, що величини малих параметрів є малими різницями між критичними

показниками ФТФП [4–6] і відповідними показниками метода І.І.Новікова [11] встановлено, що фізичною основою цих величин є наявність в системі великомасштабних флуктуацій параметру порядку.

Список використаних джерел

1. Supercritical fluids: Theory and practice. – Moscow, 2008, V.3, № 2. P.1–101. (in Russian).
2. Vostrikov A.A., Fadeeva O.N., Fadeeva I.I., Socol M.Ya. Formation of nanoparticles Al_2O_3 at aluminum oxidation by water at sub- and supercritical parameters// Supercritical fluids: Theory and practice. – 2010, V.5, № 1. P. 12-25. (in Russian).
3. Alekhin A.D. Supercritical fluid in the field of gravitation of Earth // Monitoring. Science and technologies. – 2011. – 1(6). – P. 69-78. (in Russian).
4. Patashinskiy A.Z., Pokrovskiy V.A. Fluctuation theory of phase transitions. – Moscow, Science. – 1982. (in Russian).
5. Stenli G. Phase transitions and critical phenomena. M. – 1973. – 419 p. (in Russian).
6. Ma Sh. Modern theory of the critical phenomena. – M., 1980. – 298 p. (in Russian).
7. Alekhin A.D. Calculations of critical indexes of the three-dimensional systems by the method of small parameter// YFJ – 2006. – V. 51, № 9. – P. 869-871. (in Ukrainian).
8. Alekhin A.D. Critical indices for systems of different space dimensionality // Journal of Molecular Liquids – 2005. – 120/1-3 – P. 43-45.
9. Alekhin A.D., Bilous O.I. Comparison of the values of the critical exponents of the critical fluid in the different theoretical approaches// Monitoring. Science and technologies. – 2013, № 1(14). – C.58-65. (in Russian).
10. Alekhin A.D., Bilous O.I. Analiz values criticality pokaznikov viznachenih riznimi theoreticity that empirichnimi methods // Visnyk Kiivskogo universitetu. Seriya mathe-physical sciences.– 2013, № 1. – C.275-278. (in Ukrainian).
11. Novikov I.I. Phase transitions and critical points between the solid phases. – M.: Science, 2008. – 161 c. (in Russian).
12. Anisimov M.A. The critical phenomena in liquids and liquid crystals.– M.– 1987– 280 p. (in Russian).
13. Anisimov M.A., Rabinovich V.A., Сычев B.B. Thermodynamics of critical condition of individual substances. – M. – 1990. – 190 p. (in Russian).

Надійшла до редколегії 30.04.13

УДК 539.1; 539.6; 53.096

Атамась Н.О.¹, д. ф.-м.н.,
Меклеш В.Г.², студ.

Локальна структура нескінченно розведеного водного розчину NaCl за надкритичних умов

У представлений роботі приведено дані, отримані в результаті аналізу впливу солей електроліту NaCl на локальну структуру нескінченно розведеного водного розчину і рухливість його компонент в області надкритичної температури $T = 683$ K та за нормальних умов $T = 300$ K.

Отримано та проаналізовано структурні, енергетичні та динамічні характеристики нескінченно розведеного водного розчину електроліту.

Ключові слова: локальна структура, водневі зв'язки, іони, катіони, РФР.

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: ¹atamasphys@univ.kiev.ua
²mekleshv@ukr.net

N. A. Atamas¹, Dr. Sci.,
V. G. Meklesh², stud.

Local structure of infinitely dilute aqueous solution of NaCl at supercritical conditions

In the present work are given the data obtained from the analysis of the influence of electrolyte salts NaCl on the local structure of infinitely dilute aqueous solution and the mobility of its components in the supercritical temperature $T = 683$ K and under normal conditions of $T = 300$ K.

Obtained and analyzed the structural, energetic and dynamic properties of infinitely dilute aqueous electrolyte and mobility of its components.

Effect of electrolyte on the formation of local structure of aqueous conducted by analyzing the calculated radial distribution functions.

Key Words: local structure, hydrogen bonds, ions, cations, radial distribution functions.

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: ¹atamasphys@univ.kiev.ua
²mekleshv@ukr.net

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Проведені в останні роки дослідження окиснення в надкритичній воді дали поштовх до зростання наукового інтересу щодо фізико-хімічних властивостей водних розчинів натрієвих електролітів при високих температурах і тисках. Додавання електроліту у воду дозволяє проаналізувати як структурно-утворюючі процеси так і процеси, які викликані змінами локальної структури води, проаналізувати взаємодії іон-вода і вода-вода, а також дати аналіз умов балансу між цими взаємодіями за надкритичних умов. Найбільш чітко уявити та проаналізувати описані вище явища дозволяють дослідження нескінченно розведених розчинів, в яких відсутні взаємодії між молекулами розчиненої речовини з використанням методів чисельного моделювання.

Деталі комп'ютерного експерименту

При проведенні комп'ютерного експерименту використовувався метод МД, який було реалізовано за допомогою модифікованого програмного пакету *DL_POLY* з часовим кроком 2 фс. Далекодійна електростатична взаємодія

враховувалася використанням Евальдового підсумовування. Для визначення енергетичних характеристик проводилося кілька серій незалежних розрахунків з кроком 200фс, 160фс й 80фс. Всі радіальні функції розподілу були отримані з кроком 200фс. При проведенні розрахунків катіони, аніони та атоми молекул розчинника представлялись як тверді, заряджені модельні частинки з фіксованою геометрією. Усі дослідження проводились для систем, які склались з 255 молекул води та однієї дисоційованої молекули розчиненої речовини (NaCl) при $T = 300$ K та за надкритичних умов ($\rho = 0,35$ г/см³, $T = 683$ K).

Модельні уявлення

При проведенні досліджень було обрано молекулярну модель рідини та парні потенціали, які використовують у комп'ютерному моделюванні, що є ефективними, оскільки представляють всі ефекти, пов'язані із взаємодією між багатьма частинками. Прикладом ефективного потенціалу є потенціал для рідких систем, який є сумою Леннард-Джонсівської та

кулонівської складових. Значення параметрів σ і ε для води, іонів і катіонів представлені в таблиці 1.

Таблиця 1

Заряди q та параметри (Леннард-Джонсівський параметр σ , ε та молекулярна маса M для атомів молекул води, NaCl [3])

Атом	q, e	$\sigma, \text{\AA}$	$\varepsilon, \text{ккал/моль}$	$M, \text{г/моль}$
H	+0,4238	1,0	0,154880	1
O	-0,8476	3,169	0,650200	15,990
CL ⁻	-1	4,134	0.046482	35,4527
Na ⁺	+1	2,876	0,027280	22,9897

Застосування методу молекулярної динаміки для дослідження рідин дозволяє визначити як мікроскопічні, так і макроскопічні властивості досліджуваних систем, зокрема, дає можливість одержати інформацію про структурні, термодинамічні та енергетичні властивості молекулярних і іонних розчинів. Одне з чільних місць у дослідженнях з використанням чисельних методів займають розрахунки і аналіз радіальних функцій розподілу (РФР), що характеризують ймовірності розташування атомів [4] у системі, і дозволяють визначити густину ймовірності знаходження атомів сорту «у» навколо атомів сорту «х» та є функцією відстані:

У виразі (1) чисельник дорівнює середньому числу атомів сорту «у» в сферичному шарі з радіусом між R та $(R+dR)$, а знаменник нормує розподіл так, що $g_{xy} = 1$ при N_y і дорівнює чисельній густині $\rho_y = N/V$.

$$g_{xy} = \frac{\langle N_y(R, R+dR) \rangle}{\rho_y 4\pi R^2 dR} \quad (1)$$

Експериментальним шляхом РФР одержують з даних по рентгенівській спектроскопії, та спектроскопії розсіювання нейтронів. Інтегрування РФР у межах першого максимуму [5] дозволяє точно визначити кількість найближчих сусідів. Необхідно зазначити, що положення першого максимуму РФР ототожнюється з довжиною міжатомного зв'язку, а положення першого та другого мінімумів функції РФР ототожнюється з розмірами першої і другої гідратаційних сфер. Перша гідратаційна сфера визначається як простір, обмежений сферою з радіусом, який чисельно дорівнює

положенню першого мінімуму РФР. Друга гідратаційна сфера визначається як простір сферичного шару між першим і другим мінімумами РФР. Аналіз сітки водневих зв'язків між молекулами води проводився з використанням наступного критерію водневого зв'язку: утворення водневого зв'язку можливе на відстані між найближчими сусідніми атомами кисню молекул води не більший за $3.5 \text{\AA}$. За водневий зв'язок між найближчими сусідами обирався такий, який має мінімальну відстань між атомами O та H з усіх можливих міжмолекулярних відстаней. Кут водневого зв'язку визначався як кут між $O-H$ вектором зв'язку однієї молекули води і $O-H$ вектором водневого зв'язку іншої молекули води, що приймає значення від 130° до 180° [6].

Результати експерименту та їх обговорення

Дослідження впливу температури, тиску та фізичних властивостей однозарядних натрієвих електролітів у досліджуваній водній системі доцільно почати з аналізу впливу надкритичних умов на взаємодію між молекулами води [7]. При цьому слід зазначити, що вплив температури і тиску на параметри атомів, їх розташування у молекулі води враховувався використанням значень зарядів, параметрів σ і ε , що спеціально розроблені для опису атомів молекул води у надкритичному стані і надано у роботі [3].

В результаті проведеного комп'ютерного експерименту були одержані енергетичні, структурні та динамічні характеристики досліджуваних систем. У таблиці 2 надано одержані значення середньої енергії міжмолекулярної взаємодії та її Ван-дер-Ваальсовської та кулонівської складових у нескінченно розведеному водному розчині NaCl при $T = 300 \text{ K}$ та надкритичному стані при $T = 683 \text{ K}$

Таблиця 2

Значення середньої енергії міжмолекулярної взаємодії ($E_{\text{сум}}$), Ван-дер-Ваальсовської ($E_{\text{ВдВ}}$) та кулонівської ($E_{\text{Кулон}}$) складових

T, K	$E_{\text{сум}}, \text{ккал/моль}$	$E_{\text{ВдВ}}, \text{ккал/моль}$	$E_{\text{Кулон}}, \text{ккал/моль}$
300	-1049	115	-1164
683	-738	78	-816

Одержані дані показують, що при переході до надкритичних умов значення загальної середньої енергії міжмолекулярної енергії у досліджуваних системах збільшуються за рахунок збільшення значень кулонівського

внеску. Значення Ван-дер-Ваальсівського внеску зменшуються із збільшенням значень температури досліджуваної системи, тобто зменшується роль близькодійчих взаємодій.

Таким чином, при переході до надкритичних умов слід очікувати ущільнення локальної структури рідини за рахунок збільшення далекодійчих взаємодій між частинками розчиненої речовини та молекул розчинника, що повинно знайти відображення у структурних властивостях досліджуваних систем, а саме, у зміні положень максимумів та формі РФР.

На рис.1 представлено одержані в результаті комп'ютерного експерименту РФР, які характеризують взаємодію між атомами молекул води у нескінченно розведених водних розчинах $NaCl$ при $T = 300\text{ K}$ та у надкритичному стані при $T = 683\text{ K}$ та $\rho = 0,35\text{ г/см}^3$. Порівняння одержаних даних, а саме, РФР для ймовірностей знаходження атомів кисню молекул води O^w як за нормальних умов так і надкритичному стані свідчить, що відстань між взаємодіючими молекулами води, яка ототожнюється з положенням першого максимуму відповідних РФР, за нормальних умов становить $2,8\text{ Å}$, у надкритичному стані – $2,9\text{ Å}$, тобто, знаходиться у межах похибки визначення відстаней. Таким чином, можна вважати, що перехід води у надкритичний стан за умови врахування параметрів атомів та значень потенціалів не призводить до зміни відстані між молекулами води.

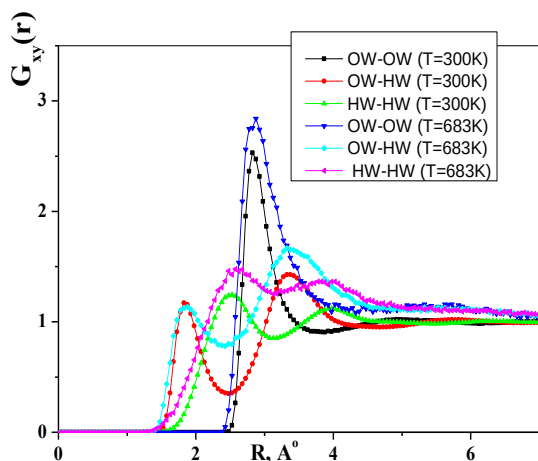


Рис. 1. РФР для ймовірності знаходження атомів молекул води у нескінченно розведеному водному розчині $NaCl$ при $T = 300\text{ K}$ та $T = 683\text{ K}$

Наступним класом взаємодій, які можуть суттєво вплинути на процеси формування

локальної структури досліджуваних рідинних систем є взаємодії $CL^- \dots H^w$, $CL^- \dots O^w$ (рис.2).

Аналіз форми РФР, положень та форми максимумів показує, що за надкритичних умов відстань між взаємодіючими частинками зменшується порівняно з нормальними умовами і складає $1,8\text{ Å}$ у випадку $CL^- \dots H^w$ та $2,8\text{ Å}$ у випадку $CL^- \dots O^w$ взаємодій. Тобто, за цих умов у системі утворюється специфічний воднево-пов'язаний комплекс $CL^- \dots H^w - O^w$ з довжиною $1,8\text{ Å}$.

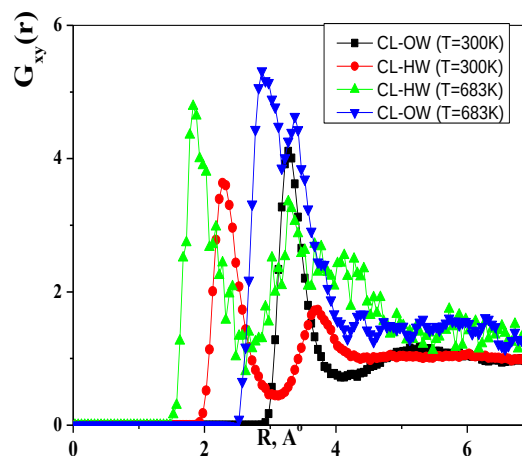


Рис. 2. РФР для ймовірності знаходження атомів молекул води, іонів CL^- у нескінченно розведеному водному розчині $NaCl$ при $T = 300\text{ K}$ та при $T = 683\text{ K}$

Слід зазначити, що іон CL^- також приймає участь у сильній кулонівській взаємодії $CL^- \dots O^w$. Таким чином, аналіз одержаних даних підтверджує факт збільшення локальної густини системи за надкритичних умов в околі CL^- . Аналіз значень РФР (рис. 3) для взаємодій $Na^+ \dots O^w$ показує, що при переході до надкритичного стану значно зростає значення $G_{xy}(R)$. Також встановлено, що цей клас $Na^+ \dots O^w$ взаємодій призводить до утворення систем вода-катіон. При цьому утворюються воднево-пов'язані комплекси $Na^+ \dots O^w - H^w$ з довжиною $2,1\text{ Å}$, яка значно менше відповідної довжини $Na^+ \dots O^w - H^w$ за $T = 300\text{ K}$ ($2,5\text{ Å}$). Аналіз РФР для $Na^+ \dots O^w$ підтверджує припущення про ущільнення локальної структури рідини за надкритичних умов у межах першої гідратаційної оболонки порівняно з нормальними умовами. Ущільнення локальної структури рідини при переході до надкритичних умов тісно пов'язано з зміною динамічних властивостей досліджуваних систем, а саме рухливості молекул води та

асоціатів, що утворюються внаслідок взаємодії води та іонів. Оцінка динамічних властивостей досліджуваних систем базується на аналізі розрахованих значень коефіцієнта дифузії частинок у досліджуваних системах.

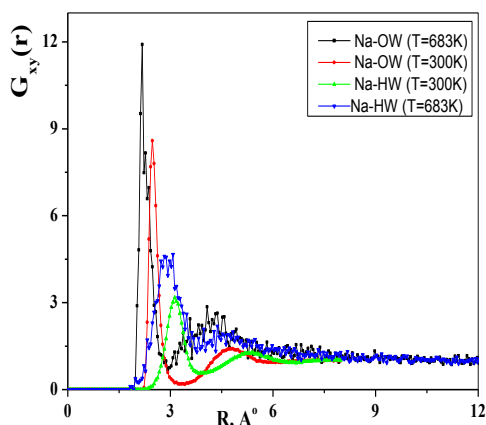


Рис. 3. РФР для ймовірності знаходження атомів молекул води, катіонів Na^+ у нескінченно розведеному водному розчині $NaCl$ при $T = 300$ К та при $T=683$ К

В нашому випадку коефіцієнт дифузії одержувався шляхом інтегрування часової автокореляційної функції (ЧКФ):

$$D = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} \langle V(t)V(0) \rangle dt \quad (2)$$

Отримані в результаті комп'ютерного значення коефіцієнта самодифузії D іонів, катіонів та молекул води за різних температур надано в таблиці 3.

Таблиця 3

Значення коефіцієнта самодифузії D (10^{-9} м²/с) іонів, катіонів та молекул води за різних температур

Речовина	T=300 К	T=683 К
Na^+	6,1	44,4
Cl^-	1,7	25,2
H_2O	12,2	42,1

Аналіз даних, що представлені в таблиці 3 показує, що збільшення температури до $T=683$ К призводить до збільшення рухливості всіх компонент досліджуваної системи. Найбільше збільшення спостерігається для значення коефіцієнта самодифузії зафіксовано іону Cl^- , яке за нормальних умов майже в шість разів менше значень коефіцієнта самодифузії води. За

температури $T = 683$ К молекули води та катіон рухаються лише в два рази швидше ніж іон Cl^- .

Висновки

Проведені дослідження впливу надкритичних умов на процеси формування локальної структури нескінченно розведених водних розчинів $NaCl$ дозволили встановити, що за цих умов у системі утворюється специфічний воднево-пов'язаний комплекс $Cl^- \dots H^w - O^w$ з довжиною 1,8 Å. При цьому також утворюються воднево-пов'язані комплекси $Na^+ \dots O^w - H^w$ з довжиною 2,1 Å, яка значно менше відповідної довжини $Na^+ \dots O^w - H^w$ за $T = 300$ К (2,5 Å). В свою чергу, одержані дані відносно значень коефіцієнта самодифузії підтверджують факт ущільнення локальної структури нескінченно розведених розчинів електролітів за надкритичних умов за рахунок утворення стійких асоціатів між молекулами води іонами або катіонами.

Список використаних джерел

1. Naworyta J.P. Dynamics Of Aqueous Solutions of Ions and Neutral Solutes at Infinite Dilution at a Supercritical Water/S.Koneshan, J.C.Rasaiah// J.Am.Chem.Soc.–2000.–Vol.122. –P.11194-11202.
2. Allen M. P. Computer Simulation of Liquids / M.P.Allen, D.Y.Tildesley. –Oxford: Clarenton Press. – 2001. – 620 p
3. S. Koneshan. J.S. Computer simulation studies of aqueous solutions at ambient and supercritical conditions using effective pair potential and polarizable potential models for water / J.S. Rasaiah, L.X. Dang//J. Chem. Phys. – 2001.–Vol.144.–P.7544-7555.
4. Jorgensen W. Optimized Intermolecular Potential Functions for Liquid Alcohols / W. Jorgensen // J. Phys. Chem. – 1986. – Vol. 90. –P. 1276 – 1284.
5. Allen M. P. Computer Simulation of Liquids / M. P. Allen, D. Y. Tildesley. –Oxford: Clarenton Press. – 2001. – 620 p.
6. Chau P.L. Computer Simulation of the Structural Effect of Pressure on the Hydrophobic Hydration of Methane / P.L. Chau, R. L. Mancera // Mol. Phys. – 1999. – Vol. 96, №1. – P.109 – 122.
7. Kalinichev A.G. Hydrogen Bonding in Supercritical Water; a Monte Carlo Study / J.D.Bass // Chem.Phys.Lett. – 1994. –Vol.231. – P.301-307.

Надійшла до редколегії 23.10.2013

УДК 544.77

Булавін Л. А.¹, д.ф.м.н., проф.
Савенко В.С.¹, аспірант
Лебовка М.І.², д.ф.м.н., проф.

Фазові переходи у воді, наповненій нанодисками

Суспензія лапоніту у воді є прикладом моделі для вивчення фазових переходів і процесів гелеутворення в системі дископодібних наночастинок. Крім того, є цікавим об'єктом дослідження, з огляду на їх широке практичне застосування. Нанодиски лапоніту реалізуються у воді як плямисті колоїди, які породжують велике різноманіття фаз (двохфазні гель, «рівноважний гель», вігнерівське скло, нематичний гель). Вказані фази визначаються анізотропією форми частинок і нерівномірним розподілом заряду на їх поверхні. Стаття присвячена огляду фазової поведінки систем вода-лапоніт.

Ключові слова: лапоніт, водні суспензії, гель, золь

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: savenkovolod@mail.ru

²Інститут біоколоїдної хімії імені Ф.Д. Овчарова, НАН України, пр-т. Вернадського, 42, 03142, м. Київ e-mail: lebovka@gmail.com

L.A. Bulavin¹, Dr. Sci
V.S. Savenko¹, PhD stud.
M.I. Lebovka², Dr. Sci.

Phase transitions in water filled by nanodisks

Suspensions of Laponite in water represent an example of model for studies of phase transitions in the system of disk-like particles. These suspensions are also interesting due to their practical applications. Nanodisks of Laponite are realized in water as patchy colloids and they generate a large variety of phases (two-phase gel, "equilibrium" gel, Wigner glass and nematic gel). These phases are controlled by the particle shape anisotropy and the heterogeneous distribution of charge on their surface. Article gives a brief overview of the phase behavior in water-Laponite systems.

Key words: Laponite, aqueous suspensions, gel, sol

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: savenkovolod@mail.ru

²Institute of Biocolloidal Chemistry named after F.D. Ovcharenko, NAS of Ukraine, 42, blvr. Vernadskogo, Kyiv 03142, e-mail: lebovka@gmail.com

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Останнім часом велику увагу привертають нові типи матеріалів на основі наночастинок з неоднорідною структурою поверхні (плямистою поверхнею), або великим ступенем анізотропії форми. Регулювання структури поверхні так званих плямистих частинок дозволяє отримувати м'які само-асоційовані матеріали з великою різноманітністю впорядкованих і неупорядкованих фаз та досить дивною фазовою і

реологічною поведінкою, що мають перспективи технологічного застосування. Для частинок з великим ступенем анізотропії форми прояв вказаних властивостей може спостерігатися вже при дуже малих степенях наповнення ($C_w < 0.1\%$), що дозволило ввести концепцію порожніх рідин та рівноважних гелів [1]. Дана робота присвячена аналізу поведінки водних суспензій дископодібних наночастинок лапоніту, які характеризуються неоднорідністю розподілу заряду та високий ступінь анізотропії форми. В статті представлена інформація про особливості

структури лапоніт і її водних суспензій. Проаналізовано вплив рН суспензії і іонної сили на седиментаційну стабільність і процеси старіння суспензій. Описуються особливості фазової діаграма водних суспензій Лапоніту, що була отримана при використанні низки різноманітних експериментальних методик, в т.ч., статичного та динамічного розсіяння світла, малокутового рентгенівського та нейтронного розсіяння а також реологічних досліджень.

Нанодиски Лапоніту

Лапоніт RD (далі по тексту лапоніт) є синтетичною глиною, що належить до групи смектитів з симетрією 2:1 і є аналогом природного гекториту. На відміну від останнього, лапоніт практично не має домішок і його частинки мають більш однорідний склад і розміри. Молекулярна формула лапоніту наступна $\text{Na}_{+0.7}[(\text{Si}_8\text{Mg}_{5.5}\text{Li}_{0.4})\text{O}_{20}(\text{OH})_4]_{-0.7}$. Нанодиски лапоніту складаються з октаедрального шару, що оточений двома силікатними тетраедральними шарами. Вони відповідно мають товщину ≈ 1 нм і діаметр 25 ± 5 нм. Вказані диски разом з протиіонами Na^+ з'єднуються у стеки (рис. 1) за допомогою електростатичного притягання.

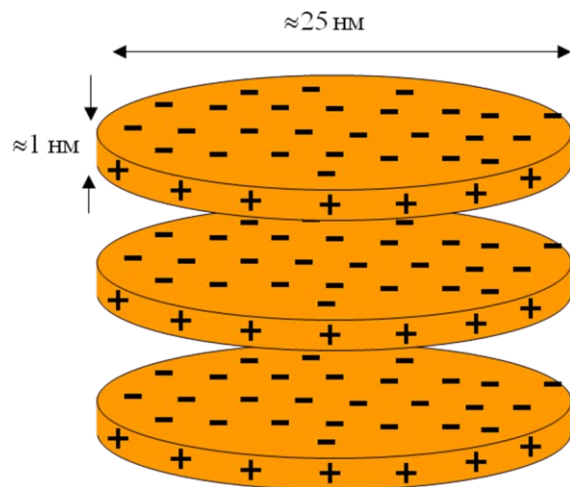


Рис. 1. Стек з нанодисків Лапоніту.

В повітряно-сухому стані лапоніт RD є білим порошком. Температура його плавлення - 900°C , питома поверхня складає $390 \text{ м}^2/\text{г}$, об'ємна густина порошку має значення близько $1 \text{ г}/\text{см}^3$, а густина самих частинок лапоніту складає $2.53 \text{ г}/\text{см}^3$ [2].

Лапоніт має широке практичне застосування як реологічний модифікатор, адже він може змінювати в'язкість водомістких систем на $3\div 5$ порядків в залежності від концентрації лапоніту (рис. 2).

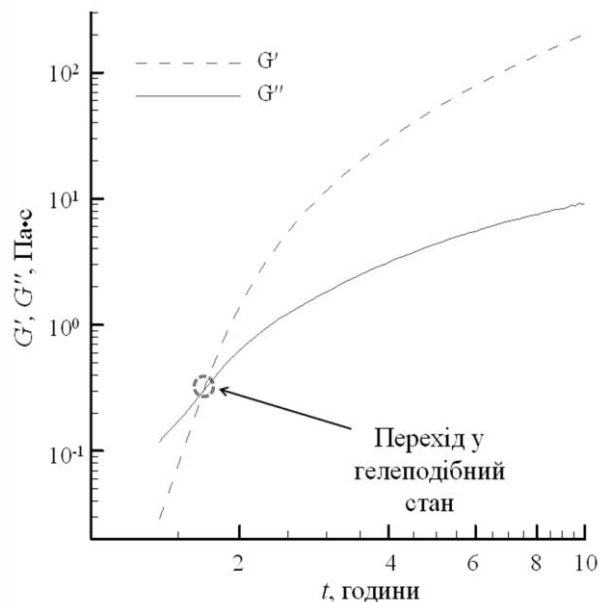


Рис. 2. Залежності модуля пружності G' та модуля втрат G'' від часу старіння для 2.5%-ї суспензії Лапоніту.

Лапоніт використовується при виготовленні виробів побутової хімії і косметичних засобів, як плівкоутворюючий агент для виробництва електропровідних, антистатичних та захисних покриттів та в багатьох інших сферах. Він має високу хімічну чистоту. Ця особливість є важливою для застосування лапоніту у виробництві персональних засобів гігієни. Крім того, лапоніт є нетоксичним і не піддається дії високих температур, не містить важких металів і є екологічно інертним, тому він є безпечним для навколишнього середовища.

Водні суспензії лапоніту, їх приготування і стабільність

У воді стеки розщеплюються (ексфоліюються) на окремі частинки, основна поверхня яких заряджена негативно, а на ободку утворюється слабкий позитивний заряд. Наприклад, при $\text{pH}=10$ сумарний негативний заряд на основній поверхні

диску Лапоніту складає ≈ 700 елементарних зарядів, що приблизно в 10 разів перевищує позитивний заряд на ободку. Негативний заряд виникає внаслідок заміщення деяких іонів магнію з октаедрального шару іонами літію. Внаслідок сильної конденсації протиіонів натрію приблизно 50% з них знаходяться поблизу поверхні наночастинок лапоніту. Таким чином, в водній суспензії лапоніту реалізується висока анізотропія зарядових взаємодій між нанодисками і ця система класифікується як плямистий колоїд [3]. В попередніх дослідженнях в більшості випадків концентрація лапоніту C_w в водних суспензіях змінювалася в діапазоні (0.01÷3.5)%. Процес ексфоліації можна значно прискорити, застосувавши ультразвуковий диспергатор чи магнітну мішалку. При більш високих концентраціях лапоніту важко приготувати просторово однорідну суспензію і спостерігається неповне розчеплення стеків. Спеціальні дослідження сконцентрованих суспензій, які були отримані видаленням води (шляхом фільтрації) з розбавлених суспензій показали, що при певній критичній концентрації спостерігається перехід системи в нематичну фазу Онзагера [4].

Важливою проблемою є стабільність частинок лапоніту в водній суспензії. При довгому зберіганні зразків водних суспензій лапоніту. Відразу після виготовлення рівень рН у водних суспензіях Лапоніту в широкому діапазоні концентрацій $C_w = (0.5 \div 3.5)\%$ має практично сталі значення $pH \approx 10$ (рис. 3). Саме при такому рН значення позитивного заряду, що несе кожна частинка лапоніту, складає приблизно 10% від його негативного заряду. Разом з тим при відносно малих рН (< 8.5) лапоніт може реагувати з іонами H^+ , які розчиняють структуру мінералу і призводять до виділення іонів Mg^{2+} та інших моновалентних іонів. Швидкість цієї реакції зменшується з збільшенням рН і стає практично нульовою при $pH > 8.5$. При тривалому зберіганні водних суспензій лапоніту рівень рН в них поступово знижується за рахунок вуглецевої кислоти, що виникає шляхом розчинення CO_2 з повітря. Тому, для уникнення руйнування величина рН, як правило, підтримується на початковому рівні. Для цього зразки зберігаються в герметичних контейнерах [5], [6]. Для уникнення розбіжностей, які можуть виникнути в результаті використання різних способів

приготування зразків бажано використовувати стандартизовану методику виготовлення суспензій [7].

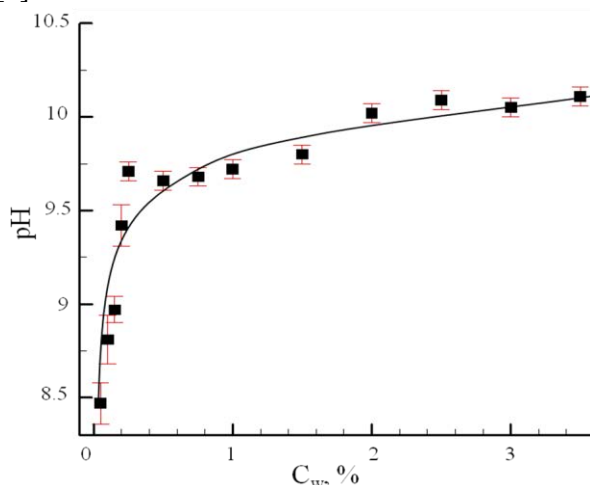


Рис. 3. Залежність рівня рН від вагової концентрації Лапоніту у воді.

Ця методика включає в себе використання дистильованої води заданої електропровідності, врахування маси абсорбованої вологи в порошок лапоніту (чи його попереднє просушування), застосування визначеної методики диспергації, а також процедури фільтрування суспензії для видалення невеликої кількості стеків, що не диспергувалися [8]. За нашими розрахунками, їх частка становить лише (1.5÷2)% від всієї маси лапоніту в суспензії.

Концентраційна фазова діаграма

На фазовій діаграмі відображається стан суспензії в залежності від концентрації нанопластинок C_w і концентрації солі C_s (іонної сили). Вивченню фазової діаграми системи вода-лапоніт присвячена низка публікацій [7].

Найпростішою є фазова діаграма суспензії вода - лапоніт без домішок солі, тобто при використанні дистильованої води. В даному випадку значення іонної сили має значення близько $C_s = 10^{-4}$ М і воно відмінне від нуля завдяки наявності вільних протиіонів Na^+ , що вимиваються з стеків Лапоніту. Незважаючи на уявну простоту цієї системи, її фазова діаграма в області концентрацій $C_w = (0 \div 3)\%$ викликала найбільше суперечок. На даний час виділено чотири різних області в залежності від концентрації Лапоніту C_w (% мас.) [7] (рис. 4):

- $C_w < 1\%$, двофазний гель. Спостерігається дуже повільне розділення суспензії на фази фракції з різною концентрацією нанодисків.
- $1.0\% < C_w < 2.0\%$, «рівноважний» гель з структурою типу карткового будиночка. Виникає внаслідок анізотропії електростатичного притягання між нанодисками.
- $2.0\% < C_w < 3.0\%$, вігнерівське (Wigner) або репульсивне скло. Виникає внаслідок відштовхування між частинками.
- $C_w > 3\%$, нематична фаза Онзагера.

Цікавими є дані досліджень для досить низьких концентрацій лапоніту, $C_w = 0.1 \div 1.2\%$ [9]. Зокрема було показано, що при $C_w < 1\%$ гелеподібний стан не є рівноважним, і з часом система розділяється на 2 фази: верхню прозору та нижню мутну. Виявилося, що верхня фаза є збідненою, нижня є збагаченою лапонітом. При малих концентраціях C_w процес фазового розділення може займати значний час (роки). Це фазовий перехід першого роду, і об'єм фази, збагаченої лапонітом зростає пропорційно його концентрації в системі [3]. При $C_w \geq 1\%$ вказана фаза займає весь об'єм. Вона була названа «рівноважним» гелем [1]. Враховуючи її надзвичайно стабільну структуру, що зберігалася незмінною на протязі понад 7 років [10]. Відзначимо, що при $C_w > 3\%$ в нематичному стані реалізується переважаюча орієнтація частинок (фаза Онзагера), наявність якої була підтверджена різними дослідниками [4], [5], [10–12].

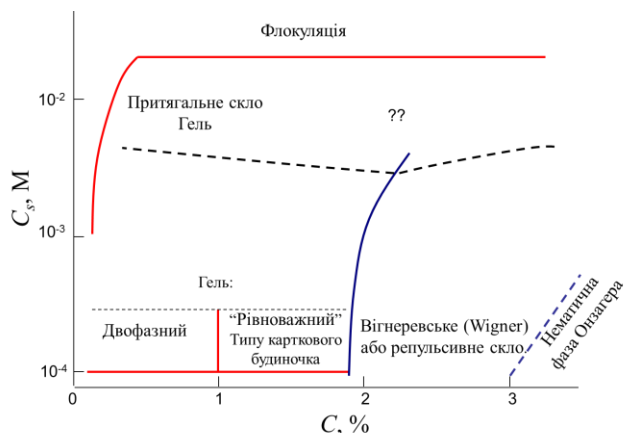


Рис. 4. Фазова діаграма суспензії вода - Лапоніт в координатах концентрації солі C_s (М) концентрація нанодисків C_w [7].

Зростання концентрації солі C_s спричиняє прискорення процесів агрегації та при іонній силі, що вища за певну критичну, відбувається флокуляція з утворенням щільних агрегатів. Ці агрегати з часом осідають, якщо цей процес не стримується переходом в гелеподібний стан. Ефект додавання солі можна пояснити зменшенням дебаївського радіусу, що в свою чергу призводить до послаблення електростатичного відштовхування між частинками лапоніту і зростанні ролі ван-дер-вальсівських взаємодій.

Перша спроба систематично дослідити фазову діаграму в координатах C_s і C_w належить авторам [13]. Виявлено фази ізотропної рідини, ізотропного гелю, нематичного гелю і флокульований стан при $C_s > 2\text{mM}$. Область концентрацій Лапоніту $(2 \div 3)\%$ автори віднести до ізотропного гелю, оскільки він утворювався через декілька годин після повної диспергації Лапоніту у водному середовищі.

Подалі було виявлено, що фазові діаграм, які запропоновані в [13], були не зовсім точними, оскільки досліджувані системи не знаходилися в стані рівноваги і не враховувався процес старіння зразків. Так, висновок про наявність ізотропного золю в області концентрацій Лапоніту до 2% при $C_s = 10^{-4}$ М не відповідає сучасним уявленням. Зокрема, результати досліджень систем з низьким вмістом частинок лапоніту при різних значеннях іонної сили виявили наявність золь-гель переходу через деякий час, що є доказом нерівноважності даних систем [14–17]. Багато суперечок викладає також фізична природа гелеподібних станів (рис.4). Різні дослідники використовуючи такі методи, як малокутове розсіювання рентгенівського випромінювання та динамічного розсіювання світла, отримували докази, як наявності гелю так і наявності скла в області концентрацій Лапоніту від 1% до 3% . На даний час встановлено, що в залежності від концентрації Лапоніту C_w та доданої солі C_s система може перебувати в двох різних гелеподібних станах [15], [18], [19]. Концентрація Лапоніту, що є граничною між цими двома станами приблизно дорівнює 2% . При цьому в залежності від концентрації нанодисків реалізуються різні неергодичні стани, які проявляються до концентрації солі $C_s < 2\text{mM}$. Ці неергодичні стани є метастабільними зафіксованими станами з яких система не може

перейти до рівноважної конфігурації (тобто упорядкованого стану). При більш високих концентраціях солі ($C_s > 3 \text{ mM}$) детальні дослідження проведені лише для досить малих концентрацій нанодисків, які свідчать про існування притягального скла або гелю в цій області. За високих концентрацій солі ($C_s > 20 \text{ mM}$) утворюється флокульований стан.

Процес старіння

Однією з головних особливостей водних суспензій лапоніту є процес старіння, який полягає в тому, що з часом стан системи змінюється в залежності від концентрації лапоніту по-різному.

Відразу після змішування лапоніту з водою, суспензія перебуває в стані золю, але поступово її в'язкість збільшується і через деякий час вона перетворюється двофазну гелеву, гелеву, або склоподібну систему. Час переходу в структуровану фазу t залежить як від концентрації Лапоніту, так і від концентрації солі, і може варіюватися від декількох годин до декількох місяців. Фазова діаграма системи вода - Лапоніт в координатах $t - C_w$ схематично представлена на рис. 5 [3].

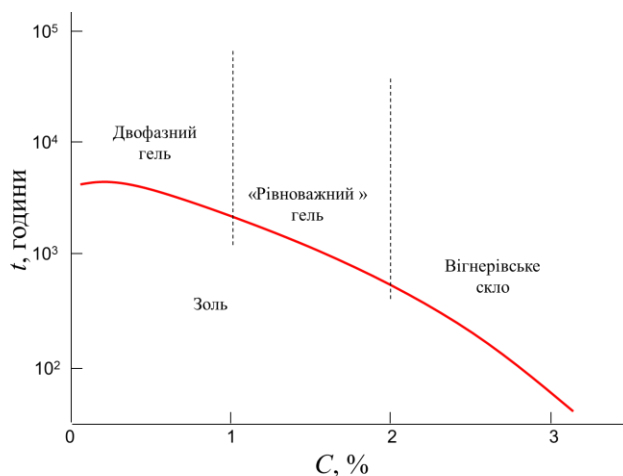


Рис. 5. Фазова діаграма суспензії вода - Лапоніт в координатах концентрації- час після приготування t (години) - концентрація нанопластинок, C_w (вар)[3].

За великих часів t в залежності від концентрації C_w система може перебувати в двофазному гелевому стані (співіснування фаз з різною

концентрацією лапоніту), «рівноважному» гелевому стані і стані вігнерівського скла. Комп'ютерні дослідження, які проведені на модельній системі плямистого колоїдна, нещодавно продемонстрували, що структура «рівноважного» гелю може бути представлена як так звана порожня рідина (arrested empty liquid), в якій сітка типу карткового будиночка неперервно перебудовується внаслідок термічних флуктуацій [3].

Висновки

Суспензія лапоніту у воді є прикладом моделі для вивчення фазових переходів в системі дископодібних наночастинок. Наночастинки лапоніту у воді реалізуються як плямисті колоїди, що породжують різноманіття фаз (двофазні гель, «рівноважний гель», вігнерівське скло, нематичний гель), викликаних анізотропією форми частинок і нерівномірним розподілом заряду на їх поверхні. Незважаючи на інтенсивні дослідження в цій області, чимало фундаментальних питань про фізичну природу явищ залишається суперечними. Велику цікавість привертають також більш складні системи на основі водних суспензій Лапоніту, доповнених іншими наночастинами (наприклад нанотрубками), поверхнево-активними речовинами та полімерами. Ці системи є важливими для використання в промисловості, технологічних процесах, медицині і фармакології, і їх вивчення безумовно сприятиме більш широкому практичному застосуванню плямистих колоїдів на основі Лапоніту.

Список використаних джерел

1. Ruzicka B., Zaccarelli E., Zulian L., Angelini R., Sztucki M., Moussaïd A., Narayanan T. and Sciortino F. Observation of empty liquids and equilibrium gels in a colloidal clay // Nat. Mater. – 2011. – vol. 10, no. 1. – P. 56-60.
2. Cummins H. Z. Liquid, glass, gel: The phases of colloidal Laponite // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2007. – vol. 353, no. 41-43. – P. 3891-3905.

3. Kegel W. K. and Lekkerkerker H. N. W., Colloidal gels: Clay goes patchy // *Nat. Mater.* – 2011. – vol. 10, no. 1. – P. 5-6.
4. Porion P., Faugère A. M., and Delville A. Analysis of the Degree of Nematic Ordering within Dense Aqueous Dispersions of Charged Anisotropic Colloids by ^{23}Na NMR Spectroscopy // *The Journal of Physical Chemistry B.* – 2005. – vol. 109, no. 43. – P. 20145-20154.
5. Mourchid A., Lécolier E., Van Damme H., and Levitz P. On viscoelastic, birefringent, and swelling properties of laponite clay suspensions: Revisited phase diagram // *Langmuir.* – 1998. – vol. 14, no. 17. – P. 4718-4723.
6. Mongondry P., Tassin J. F., and Nicolai T. Revised state diagram of Laponite dispersions // *Journal of Colloid and Interface Science.* – 2005. – vol. 283, no. 2. – P. 397-405.
7. Ruzicka B. and Zaccarelli E. A fresh look at the Laponite phase diagram // *Soft Matter.* – 2011. – vol. 7, no. 4. – P. 1268-1286.
8. Nicolai T. and Cocard S. Light scattering study of the dispersion of laponite // *Langmuir.* – 2000. – vol. 16, no. 21. – P. 8189-8193.
9. Ruzicka B., Zaccarelli E., Zulian L., Angelini R., Sztucki M., Moussaid A., Narayanan T. and Sciortino F. A phase separation in diluted Laponite suspensions: evidence of empty liquid and equilibrium gel states // *ArXiv e-prints.* – 2010. - <http://arxiv.org/pdf/1007.2111.pdf>
10. Mourchid A., Delville A., Lambard J., Lécolier E., and Levitz P. Phase diagram of colloidal dispersions of anisotropic charged particles: Equilibrium properties, structure, and rheology of laponite suspensions // *Langmuir.* – 1995. – vol. 11, no. 6. – P. 1942-1950.
11. Lemaire B. J., Panine P., Gabriel J. C. P. and Davidson P. The measurement by SAXS of the nematic order parameter of laponite gels // *Europhysics Letters.* – 2002. – vol. 59, no. 1, 2002, P. 55-61.
12. Shahin A. and Joshi Y. M. Erratum: Irreversible aging dynamics and generic phase behavior of aqueous suspensions of laponite // *Langmuir.* – 2010. – vol. 26, no. 14. – P. 12472.
13. Mourchid A., Delville A., Lambard J., Lécolier E. and Levitz P. Phase diagram of colloidal dispersions of anisotropic charged particles: Equilibrium properties, structure, and rheology of laponite suspensions // *Langmuir.* – vol. 11, no. 6. – P. 1942-1950.
14. Levitz P., Lecolier E., Mourchid A., Delville A. and Lyonnard S. Liquid-solid transition of Laponite suspensions at very low ionic strength: Long-range electrostatic stabilisation of anisotropic colloids // *Europhysics Letters.* – 2000. – vol. 49, no. 5. – P. 672-677.
15. Ruzicka B., Zulian L. and Ruocco G. Routes to gelation in a clay suspension // *Physical Review Letters.* – 2004. – vol. 93, no. 25. – P. 8031-8035.
16. Nicolai T. and Cocard S. Dynamic light-scattering study of aggregating and gelling colloidal disks // *Journal of Colloid and Interface Science.* – 2001. – vol. 244, no. 1. – P. 51-57.
17. Nicolai T. and Cocard S. Structure of gels and aggregates of disk-like colloids // *European Physical Journal E.* – 2001. – vol. 5, no. 2. – P. 221-227.
18. Jabbari-Farouji S., Tanaka H., Wegdam G. H., and Bonn D. Multiple nonergodic disordered states in Laponite suspensions: A phase diagram // *Phys Rev.* – 2008. – vol. 78, no. 6. – P. 1405.
19. Abou B., Bonn D. and Meunier J. Aging dynamics in a colloidal glass // *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics.* – vol. 64, no. 21. – P. 5101-5106.

Надійшла до редколегії 09.09.2013

УДК 535.37;535.34;667.287.4

Вишневецький С.Ю.¹, асп.,
Дмитрук І.М.¹, д.ф.м.н., проф.,
Науменко А.П.¹, к.ф.-м.н., с.н.с.,
Брікс Ю.Л.², к.х.н., с.н.с.,
Сломінський Ю.Л.², к.х.н., с.н.с.

Особливості взаємодії поліметинових
барвників із напівпровідниковими
наночастинками при низьких
температурах

В роботі представлено результати
дослідження взаємодії поліметинових барвників
та напівпровідникових наночастинок. Нами
було розглянуто два барвники із різною
здатністю до утворення агрегатів. Показано,
що їх взаємодія із наночастинками різного
розміру не буде протікати однаково.

Ключові слова: напівпровідникові
наночастинки, поліметинові барвники,
агрегати, фотолюмінесценція.

¹ Київський національний університет імені
Тараса Шевченка,
01601, м. Київ, вул. пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: S.Vyshnevskyy@univ.kiev.ua,

² Інститут органічної хімії НАН
України, 02660, м Київ, вул. Мурманська 5,
e-mail: jbricks@ioch.kiev.ua,

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

Поліметинові барвники (ПБ) – широко
досліджений клас барвників, які довгий час
використовувались для спектральної селекції білі-
зації галогенід-срібних фотоматеріалів. Почат-
ково барвники використовували переважно в
молекулярній формі, проте зараз увагу багатьох
дослідників вони привертають здатністю до
утворення агрегатів. Формування таких надмоле-
кулярних структур добре описано в літературі
[1–4]. Дослідження J- та H- агрегатів при низьких
температурах описано в роботах [5–8].

Однією з актуальних задач в дослідженні ПБ
є вивчення їх взаємодії із напівпровідниковими
або металевими наночастинками (НЧ). У роботах
[9,10] наводяться результати дослідження систем
із резонансною передачею збудження. Так,
завдяки поєднанню цих об'єктів в одну
світлопоглинаючу і випромінюючу систему із

Vyshnevskyy S.Yu.¹, PhD stud.,
Dmitruk I.M.¹, Dr. Sci., Prof.,
Naumenko A.P.¹, PhD, Sen. Sci. Res.,
Bricks J.L.², Ph.D, Sen. Sci. Res.,
Slominskii Yu.L.², Ph.D. Sen. Sci. Res.

Features of the Interaction of Polymethine
Dyes with Semiconductor Nanoparticles at
Low Temperatures

The paper presents results of a study of
interaction between polymethine dyes and
semiconductor nanoparticles. We have examined
two dyes with different ability to form aggregates. It
is shown that their interaction with nanoparticles
with different sizes will flow in different ways.

Key Words: semiconductor nanoparticles,
polymethine dyes, J-aggregates, luminescence.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Glushkova ave. 4d.
e-mail: S.Vyshnevskyy@univ.kiev.ua

² Institute of Organic Chemistry NAS of
Ukraine, 02660, Kyiv, Murmanska st.5,
e-mail: jbricks@ioch.kiev.ua

резонансною передачею енергії, можливо суттєво
покращити їх люмінесцентні властивості. Окрім
цього малодослідженим є сам механізм адсорбції
барвника на поверхні НЧ, а також того, як
агрегація на поверхні напівпровідникової
наночастинки впливає на поглинання світла,
загасання збудженого стану та на фотоіндуковані
деградаційні процеси в барвнику. В роботах
[11,12] розглянуто можливі випадки взаємодії
молекул барвника та НЧ в розчині. Показано, що
наночастинки можуть як сприяти агрегації [11],
так і заважати утворенню агрегатів [12].

В наступній частині описано
експериментальні процедури та вимірювання. В
частині 3 представлено експериментальні
результати та обговорення.

Експериментальна частина

В даній роботі було використано три різні
види наночастинок селеніду кадмію:

наночастинки розміром 1,2 нм, з вузьким розподілом за розмірами та розміром 1,1 нм і 2,3 нм, з широким розподілом за розмірами. Для отримання НЧ із вузьким розподілом за розмірами було взято метод приготування фулереноподібних НЧ у водному розчині, описаний в роботі [13]. В даній роботі під час синтезу в якості прекурсорі кадмію використовувався CdCO_3 , що призвело до значного скорочення часу протікання реакції (до 15 хвилин).

НЧ1 було отримано наступним чином: в 0,925 мл дистильованої води змішувались 0,075 мл 0,05 М розчину Na_2SeSO_3 із 2 мг CdCO_3 , до них додавалось 15 мг NaOH та 16 мг L-cysteine. Ріст частинок відбувався при постійному перемішуванні протягом 15 хвилин і відстоюванні протягом доби в затемненому приміщенні при температурі 20–25°C.

Спектр поглинання колоїдного розчину НЧ1 представлено на Рис.1. Він складається з вузького інтенсивного піку при 420 нм та побічного піку при 390 нм, що добре узгоджується з даними, наведеними в роботі [13].

НЧ2 було отримано шляхом неселективного фототравлення НЧ1 напівпровідниковим лазером із довжиною хвилі 406 нм протягом 26 хвилин при постійному перемішуванні, що призвело до відпалювання частини атомів з поверхні. Це супроводжувалось випадінням осаду гідроксиду кадмію білого кольору. При цьому розмір наночастинок зменшувався, але одночасно з цим змінювалась і їх структура: замість фулереноподібних магнічних кластерів утворювались наночастинки кристалічної

структури.

Приготування наночастинок більшого розміру відбувалось за допомогою цієї ж схеми синтезу, але із збільшеною концентрацією прекурсорів кадмію та селену, а концентрацію цистеїну також було збільшено.

Для отримання НЧ3 в 10 мл дистильованої води змішувались 2 мл 0,05 М розчину Na_2SeSO_3 із 18 мг CdCO_3 , до них додавалось 16 мг NaOH та 40 мг L-cysteine. Ріст частинок відбувався при постійному перемішуванні протягом 15 хвилин і відстоюванні протягом доби в затемненому приміщенні при температурі 20–25°C. При відстоюванні протягом тижня спостерігалась преципітація частинок і випадіння їх у вигляді осаду. Тому було використано ультразвукову мішалку для гомогенізації розчину. (див. рис.1)

Розміри наночастинок було оцінено за положеннями максимумів їх спектрів поглинання, згідно із методикою наведеною в роботі [14]. Так максимуми смуг поглинання НЧ1, НЧ2, НЧ3 знаходяться на довжинах хвиль 420 нм, 408 нм і 510 нм відповідно. Згідно із роботою [14], це відповідає наночастинкам розміром 1.22 нм, 1.1 нм та 2.3 нм відповідно, точність методики становить десяті долі ангстрема.

В роботі було використано два подібних барвники (див. рис 2), при цьому барвник 1 не утворює агрегатів у воді, а барвник 2 здатний утворювати J-агрегати. Барвники було отримано стандартним методом згідно із [15].

Колоїдні розчини барвник+НЧ готувались наступним чином: колоїдні розчини наночастинок розводилися дистильованою водою

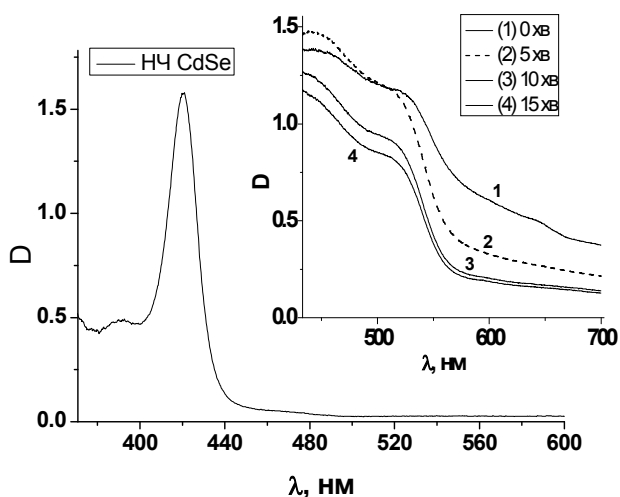


Рис. 1. Спектр поглинання отриманих за описаною вище методикою НЧ CdSe із максимумом 420 нм. На вставці зображено спектри поглинання НЧ3 до обробки та після.

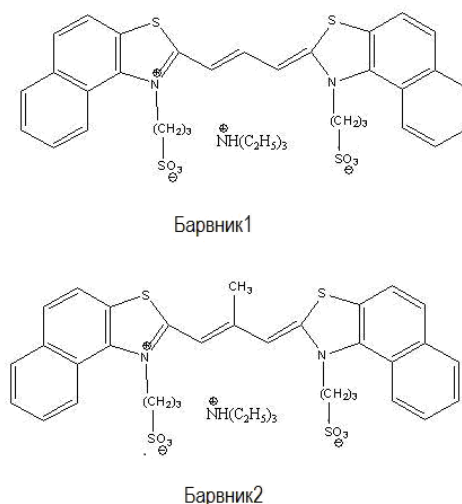


Рис. 2. Структурні формули барвника 1 (неагрегатоутворюючий) та барвника 2 (агрегатоутворюючий)

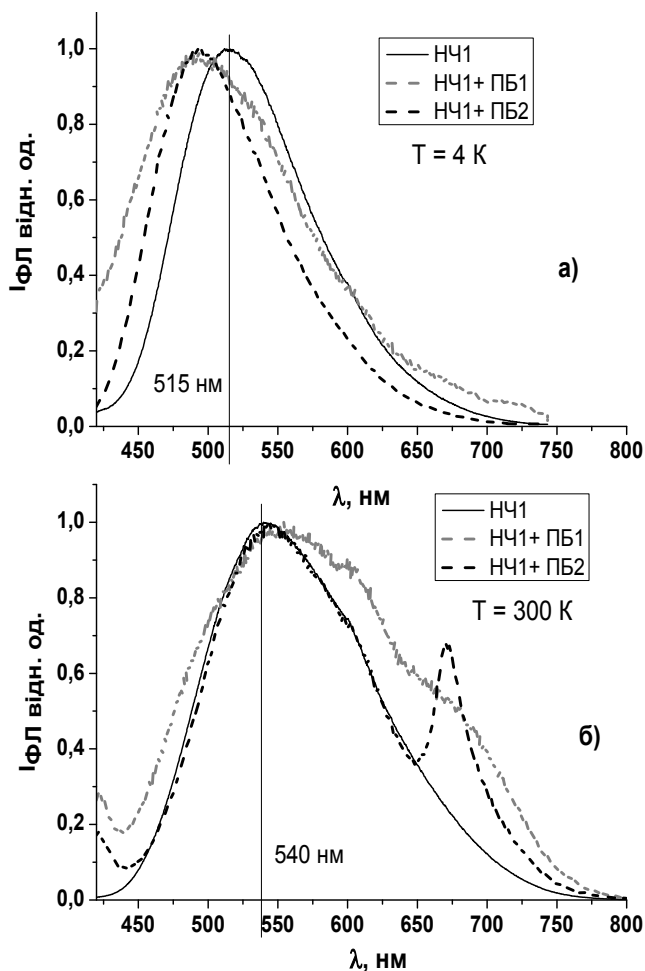


Рис. 3. Нормовані спектри ФЛ НЧ1 з барвником 1 та барвником 2 а) при $T = 4\text{ K}$, б) при $T = 300\text{ K}$.

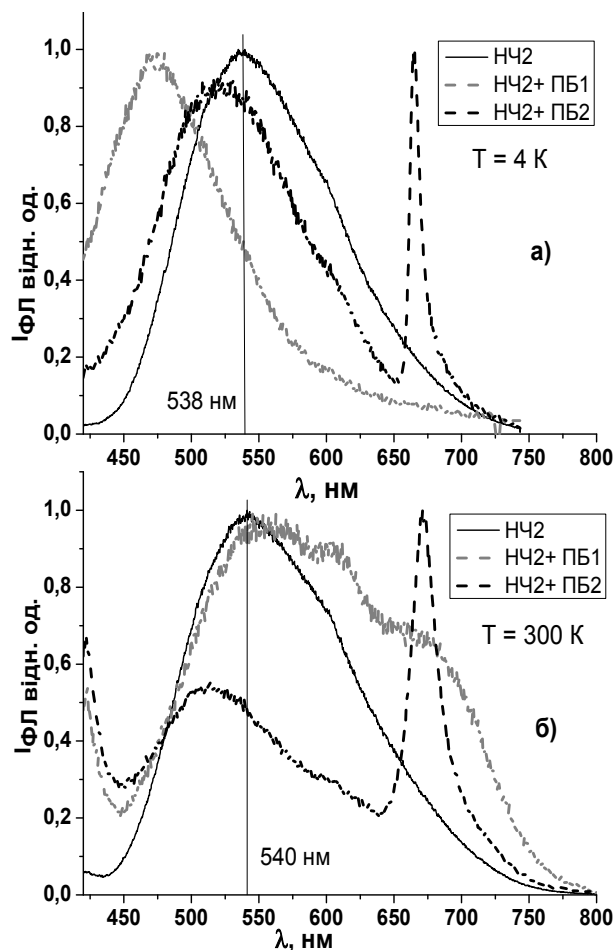


Рис. 4. Нормовані спектри ФЛ НЧ2 з барвником 1 та барвником 2 при а) $T = 4\text{ K}$, б) $T = 300\text{ K}$.

у відношенні 1:1, після чого додавався стоковий розчин барвника ($2 \times 10^{-3}\text{ M}$). Концентрація барвників в готових розчинах була рівною $1 \times 10^{-5}\text{ M}$.

Для запису фотолюмінесценції (ФЛ) отримані розчини наносились на підкладку (алюмінієву фольгу) і лишались до висихання. В якості джерела випромінювання для запису спектрів поглинання було використано галогенову лампу розжарювання. Одногратковий монохроматор МДР-3 використовувався для запису спектрів поглинання та люмінесценції. Збудження люмінесценції відбувалось за допомогою напівпровідникового лазера із $\lambda = 406\text{ nm}$.

Результати і обговорення

На рисунках 3,4 і 5 наведено спектри фотолюмінесценції НЧ та НЧ з барвниками при температурі 4К (а) та 300К (б).

Порівнюючи спектри ФЛ зображені на рис. 3а та рис. 3б, бачимо, що присутня при

температурі 300К лінія J-агрегату барвника 2 (672 nm) відсутня при температурі 4К. Так само і смуги випромінювання барвника 1 інтенсивні при 300К і дають незначний вклад в люмінесценцію зразка при 4К.

Порівнюючи спектри люмінесценції неагрегуючого барвника 1, кон'югованого із НЧ1 та НЧ2, бачимо, що в цьому випадку контури випромінювання співпадають при $T = 300\text{ K}$ (рис 3б та 4б). При цьому у випадку агрегуючого барвника 2 спостерігається сильна відмінність (синя крива на рис 3б та 4б).

Порівнюючи рис.4а і 4б, бачимо дещо подібну ситуацію до попереднього випадку. Так при низькій температурі зникають смуги випромінювання барвника 1 і падає інтенсивність люмінесценції агрегатів барвника 2 відносно люмінесценції НЧ.

Причина такої поведінки спектрів люмінесценції барвників, кон'югованих із наночастинками 1,2 nm (НЧ1) та 1,1 nm (НЧ2), може полягати в існуванні передачі збудження

від наночастинок до молекул або агрегатів барвника. Це явище описано в літературі [наприклад, роботи 9,10]. Проте опису поведінки таких систем при низькій температурі нами знайдено не було. Логічно припустити, що передача збудження, наявна при 300 К, при зниженні температури унеможливується. Окрім цього в обох випадках спостерігається додатковий до температурного зсув в короткохвильову область контуру випромінювання наночастинок в присутності барвника при $T = 4$ К. Пояснення цього явища в літературі також знайдено не було. Причому у випадку НЧ2 зсув різний для різного барвника. Можливою причиною цього є те, що в ході неселективного фототравлення утворилося декілька груп наночастинок із різними розмірами, формою та структурою і при цьому барвник 1 краще взаємодіє з однією групою НЧ, а барвник 2 з іншою.

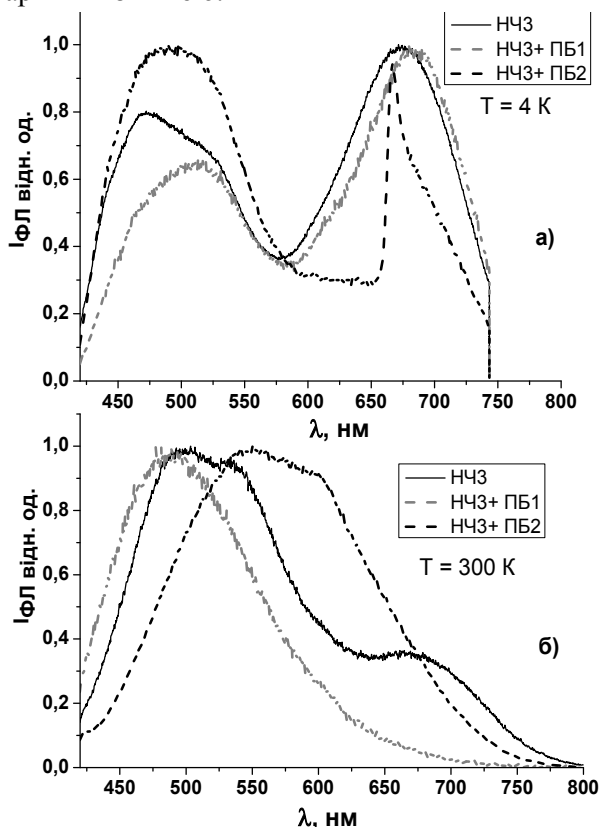


Рис. 5. Нормовані спектри ФЛ НЧ3+барвник 1 та НЧ3+барвник 2 при а) $T = 4$ К, б) $T = 300$ К.

Спектр випромінювання наночастинок 3 (рис.5а та 5б) складається з довгохвильового крила і короткохвильового крила. Причому, як можна побачити на рис.5а, при температурі 4К в присутності барвника 2 відбувається гасіння довгохвильового крила люмінесценції НЧ. Це

може бути наслідком поглинання випромінювання НЧ агрегатами барвника або пов'язане із передачею збудження від наночастинок до барвника. При цьому спостерігається перерозподіл інтенсивностей, а саме зростання інтенсивності ФЛ короткохвильового крила на фоні гасіння довгохвильового крила. В присутності барвника 1 довгохвильове крило незначно зміщується в синю область спектру із одночасним зменшенням інтенсивності короткохвильового крила. Натомість при $T = 300$ К спостерігається зовсім інша картина. Так, спектр люмінесценції наночастинок розміром 2,3 нм складається з двох смуг поблизу 500 нм і довгохвильового крила, обумовленого ймовірно люмінесценцією, пов'язаною із дефектами на поверхні НЧ. У випадку наночастинок із барвниками спектри люмінесценції зазнали значних змін. Так, у випадку барвника 1 спостерігалось звуження смуги випромінювання, зникнення довгохвильового крила, а також незначний зсув в короткохвильовий бік. В той же час для агрегатоутворюючого барвника 2 спостерігалась значне ослаблення випромінювання на довжині хвилі 500 нм, максимум інтенсивності ФЛ зсунувся до 550 нм, чітко вираженого довгохвильового крила також не спостерігалось. Окрім цього не було чітко вираженої смуги ФЛ J-агрегатів барвника (що має знаходитись при 660 нм), при цьому при $T = 4$ К люмінесценція J-агрегатів добре розрізняється в загальному спектрі.

Порівнюючи наведені вище спектри ФЛ наночастинок та наночастинок з поліметиновим барвниками, можна помітити багато відмінностей у взаємодії агрегатоутворюючого та неагрегатоутворюючого барвників із наночастинами селеніду кадмію різних розмірів. Так, розглядаючи випадок барвник 1+НЧ, бачимо, що при кімнатній температурі не спостерігається значних відмінностей між спектрами ФЛ чистих наночастинок діаметром 1,2 та 1,1 нм та спектрами ФЛ цих же наночастинок із барвником 1. Одночасно із цим спостерігається значна трансформація спектра ФЛ 1,1 нм НЧ при взаємодії із агрегатоутворюючим барвником 2, хоча спектр ФЛ наночастинок 1,2 нм із кон'югованим до них барвником 2 лишається незмінним.

Схема, використана для синтезу наночастинок 1, що описана в роботі [13], призначена для синтезу так званих "магічних

кластерів” – фулереноподібних наночастинок розміром 1,2 нм із дуже вузьким розподілом за розмірами. Як було вище зазначено, взаємодія цих наночастинок із обома барвниками була однаковою. Відмінностей не спостерігалось ні при $T = 300$ К, ні при $T = 4$ К. Більше того, спостережуваний нами зсув в короткохвильову область спектру ФЛ наночастинок із барвниками по відношенню до спектру чистих НЧ в цьому випадку відбувся з 515 нм до 495 нм однаково для обох барвників.

Відмінності у спектрах ФЛ з’являються при переході до наночастинок із широким розподілом за розмірами. Так, значні відмінності у спектрах ФЛ спостерігалися для барвників, кон’югованих до НЧ2 розміром 1,1 нм, що були отримані за допомогою неселективного фототравлення НЧ1, яке призвело до зменшення їх розміру, уширенню розподілу за розмірами, а також до зміни структури із фулереноподібної на структуру об’ємного кристалу. Згідно із твердженням авторів роботи [13], такі магнічні кластери стають нестійкими і втрачають структуру при видаленні навіть одного атому з поверхні. В нашому випадку спектр люмінесценції наночастинок до і після фототравлення лишився практично незмінним при $T = 300$ К. При цьому при охолодженні до 4 К максимум спектру люмінесценції НЧ1 зсунувся з 540 нм до 515 нм, але у випадку НЧ2 положення максимуму змістилось лише до 438 нм. У випадку барвника1 відмінність між спектрами ФЛ барвника із наночастинами 1,1 та 1,2 нм не спостерігаються при $T = 300$ К. Водночас, величина зсуву положення максимумів інтенсивності ФЛ, при охолодженні зразків до 4 К була різною для барвника1, кон’югованого із НЧ1 та НЧ2. Так, положення максимуму смуги випромінювання зразка НЧ1+барвник1 по відношенню до максимуму смуги випромінювання чистих НЧ1, при температурі 4 К, змістилось із 515 до 495 нм. В той же час для чистих НЧ2 та НЧ2 із барвником 1 ці значення були 538 нм та 470 нм. Отже, у випадку 1,1 нм наночастинок значення зсуву максимуму ФЛ при 4 К внаслідок взаємодії із барвником в 3 рази більший, ніж для фулереноподібних НЧ розміром 1,2 нм. У випадку агрегатоутворюючого барвника 2 цей зсув близький до 20 нм для обох видів наночастинок. Так, при $T = 4$ К положення максимуму смуги випромінювання НЧ1 знаходиться при 515 нм, а НЧ1+барвник 2 – 495 нм, так само і для НЧ2 положення максимумів знаходяться при 538 нм для чистих

наночастинок та при 520 нм для наночастинок із барвником2.

Якщо спостерігати за інтенсивністю ФЛ J-агрегатів барвника 2, то з наведених спектрів ФЛ видно, що найбільше відношення інтенсивності люмінесценції агрегатів до інтенсивності люмінесценції НЧ має місце при $T = 300$ К для наночастинок 1,1 нм (рис. 4б), тоді як при $T = 4$ К інтенсивності люмінесценції J-агрегатів та НЧ2 стають майже рівними (рис. 4а). Для 1,2 нм наночастинок інтенсивність ФЛ агрегатів менша за інтенсивність люмінесценції НЧ вже при 300 К, а при 4 К смуга випромінювання J-агрегатів барвника 2 зникає взагалі (рис. 3б та 3а).

У випадку наночастинок діаметром 2,3 нм спостерігається зовсім інша картина. Так, ми не змогли знайти пояснення зміщенню максимуму інтенсивності ФЛ наночастинок до 480 нм при приєднанні барвника1 та до 545 нм при приєднанні барвника 2. Також важливо, що відбувається звуження контуру випромінювання НЧ при приєднанні барвника 1, в той час як для барвника 2 це не відбувається. Звуження контуру випромінювання та відсутність довгохвильового крила можна пояснити такою взаємодією між молекулами барвника та поверхнею наночастинок, при якій молекули барвника пригнічують люмінесценцію дефектних станів на поверхні НЧ (довгохвильове крило), що призводить до зростання власного випромінювання НЧ (лишається тільки один пік на контурі випромінювання). Можливим поясненням таких відмінностей у взаємодії з двома барвниками є припущення, що при наявності великого розподілу за розмірами наночастинок, барвник 1 і барвник 2 краще взаємодіють із різними наночастинами. Ми припускаємо, що барвник 1 найкраще взаємодіє із одним розміром НЧ, з тих які є в розчині, а барвник 2 з іншим і відповідно до такої селективності в спектрі ФЛ зразка НЧ3+барвник 1 лишилась найкороткохвильовіша смуга випромінювання, що відповідає найменшим наночастинам, з тих які були в колоїдному розчині НЧ3, а у випадку барвника 2 найінтенсивнішим є люмінесценція більших наночастинок. При цьому, при $T = 4$ К пасивація поверхні НЧ молекулами барвника (пригнічення довгохвильового крила ФЛ) спостерігається лише для барвника 2. В той час як для барвника 1 при 4 К спостерігається і довгохвильове і короткохвильове крила. Тобто, для цього барвника взаємодія із поверхнею НЧ більш

ефективна при вищій температурі, а при низькій майже не відбувається.

Висновки

Нами описано поведінку систем напівпровідникова НЧ + поліметиновий барвник при низькій температурі.

Показано, що у випадку барвників із різною здатністю до агрегації, взаємодія із НЧ з широким розподілом за розмірами буде суттєво

різною. В той же час обидва барвники однаково взаємодіють із наночастинками з дуже вузьким розподілом за розмірами.

Також було спостережено додатковий до температурного зсув контуру випромінювання НЧ в присутності барвника. Пояснення цього явища потребує подальших досліджень.

Список використаних джерел

1. Shapiro B. I., Molecular assemblies of polymethine dyes, RUSS CHEM REV, 2006, 75 (5), 433–456 (in Russian).
2. Fylymonova I.I., Yefimova S.L., Sorokin A.V., The formation of J-aggregates in solutions of reverse micelles, Functional Materials, №3(2012)
3. Nicolenko LM, Ivanchikhina AV, Features of the formation of J-aggregates of cyanine dyes in the cases they are doing inverse micelles of AOT / water / hexane, Chemistry of high energy, 2010, Volume 44, № 6, p. 546–554 (in Russian).
4. Saikin Semion K., Eisfeld Alexander, Valleau Stéphanie and Alán Aspuru Guzik, Photonics meets excitonics: natural and artificial molecular aggregates, Nanophotonics, 2013; 2(1), p. 21–38.
5. Spitz C. and Daehne S., Low temperature exciton-exciton annihilation in amphi-PIPE J-aggregates, International Journal of Photoenergy, Volume 2006,(2006),Pages1–7.
6. Chaudhuri Debangshu, Li Dongbo, Yanke Che, Shafran Eyal, Gerton Jordan M., Zang Ling, and Lupton John M., Enhancing Long-Range Exciton Guiding in Molecular Nanowires by H-Aggregation Lifetime Engineering, Nano Lett., 2011, 11 (2), pp 488–492
7. Kemnitz K., Yoshihara K., Suzumoto T., Tani T., Lindrum M., Moll J., Daehne S., Primary photophysical processes in J-aggregates of spectral sensitizers, Journal of Chemical Sciences, October 1993, Volume 105, Issue 6, pp 783–795.
8. Vieira Ferreira L. F., Oliveira A.S., Wilkinson F. and Worrall D., Photophysics of cyanine dyes on surfaces. A new emission from aggregates of 2,2'-cyanines adsorbed onto microcrystalline cellulose, J. Chem. Soc., Faraday Trans, 1996,92, 1217–1225.
9. Walker Brian J., Nair Gautham P., Marshall Lisa F., Bulovic Vladimir, and Bawendi Mouni G., Narrow-Band Absorption-Enhanced Quantum Dot/J-Aggregate Conjugates, J. AM. CHEM. SOC. 9 VOL. 131, NO. 28, 2009 9625
10. Halpert Jonathan E., Tischler Jonathan R., Nair Gautham, Walker Brian J., Liu Wenhao, Bulovic Vladimir, and Bawendi Mouni G., Electrostatic Formation of Quantum Dot/J-aggregate FRET Pairs in Solution, J. Phys. Chem. C 2009, 113, 9986–9992
11. Nicolenko LM, Brichkin SB, Razumov VF, Study of hybrid structures of J-aggregate dye-semiconductor nanocrystal in reverse micelles Izvestia Akademii of Sciences. Chemical Bulletin, 2011, № 6. (in Russian).
12. McArthur Eric A., Godbe Jacqueline M., Tice Daniel B., and Weiss Emily A., A Study of the Binding of Cyanine Dyes to Colloidal Quantum Dots Using Spectral Signatures of Dye Aggregation, J. Phys. Chem. C, 2012, 116, 6136–6142
13. Park Yeon-Su, Dmytruk Andriy, Dmitruk Igor, Kasuya Atsuo, Takeda Motohiro, Ohuchi Noriaki, Okamoto Yukihiro, Kaji Noritada, Tokeshi Manabu, and Baba Yoshinobu, Size-Selective Growth and stabilization of small CdSe nanoparticles in aqueous solution, ACS Nano, 2010, 4 (1), pp 121–128.
14. Bacherikov Yu Yu, Davydenko M O, Dmytruk A M, Dmitruk I M, Lytvyn P M, Prokopenko I V and Romanyuk V R, 2006. CdSe nanoparticles grown with different chelates. Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. 9: 75–79.
15. Hamer F.M., The cyanine dyes and related compounds, 1964, N.Y., L., 790p.

Надійшла до редколегії 16.10.13

УДК 536

Гаврюшенко Д.А., д. ф.-м.н., проф.

Розподіл концентрації в клиноподібній порожнині

Проведено теоретичне дослідження впливу кореляційних ефектів на просторовий розподіл концентрації бінарного розчину в околі критичної точки розширювання в клиноподібній порожнині, біля стінок якої діють сили, потенціал яких спадає за експоненціальним законом. Показано, що при наближенні до границі стійкості системи суттєве відхилення концентрації має місце у всьому об'ємі системи. Виявлено існування кросоверної області у випадку обмеженої системи клиноподібної пори.

Ключові слова: бінарний розчин, критична точка розширювання, локальні ефекти.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: dg@univ.kiev.ua

D.A. Gavryushenko, Dr. Sci., Prof.

Concentration distribution within wedge pore in the vicinity of critical point

The theoretical investigation of correlation effects on a spatial distribution of a binary solution concentration in the vicinity of a critical point has been carried out within a wedge pore with exponential surface forces. It was shown that essential deviations of the concentration within the hole volume of the a pore exists in the vicinity of a border of a system stability. The crossover region existence has been demonstrated in the wedge finite-size system.

Key Words: binary solution, critical point, local effects.

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: dg@univ.kiev.ua

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Кількісний опис бінарного розчину однорідної рідини в широкому інтервалі зміни термодинамічних параметрів, можна провести як методами статистичної фізики, так і термодинаміки. Стан такої системи можна повністю задати набором інтенсивних параметрів, жоден з яких не описує розмірів системи або форми поверхні, що її обмежує, та загальним числом частинок $N = N_A + N_B$, де N_A та N_B – кількість частинок сорту "А" та "В" відповідно. Можна виділити дві основних причини появи цієї неоднорідності: перша пов'язана з дією зовнішніх полів з потенціалом $u(\vec{r})$, а друга – з наявністю стінок, що обмежують систему [1].

Традиційні методи опису властивостей неоднорідної системи полягають в розбитті її на достатньо тонкі шари між двома еквіпотенційними поверхнями і представленні відповідних термодинамічних потенціалів такої системи як суми термодинамічних потенціалів цих шарів [2]. Базуючись на цьому підході, для хімічного потенціалу однокомпонентної системи

$\mu(\vec{r})$ у зовнішньому полі можна отримати відому класичну формулу:

$$u(\vec{r}) = \mu_0 - \mu(\vec{r}), \quad (1)$$

де μ_0 – хімічний потенціал системи за відсутності зовнішнього поля (1).

Ситуація в самій критичній точці за наявності зовнішнього поля (навіть достатньо гладкого), потребує особливого підходу. Так як в критичній точці похідні $\vec{\nabla} \Delta x(\vec{r})$ стають сингулярними, у виразі (6) відповідні доданки починають відігравати превалюючу роль. Але оскільки в околі точки розширювання на критичній ізотермі, згідно з теорією масштабних перетворень [3],

$(\mu - \mu_c) \sim |x - x_c|^\delta$, де δ – критичний індекс, то зрозуміло, що прямі кореляційні функції порядку шість і більше стають далекодіючими, і нульові моменти прямих кореляційних функцій відповідних порядків розбігаються в самій критичній точці.

Зрозуміло, що даний підхід є локальним у тому розумінні, що він передбачає розгляд

термодинамічних потенціалів системи як функцій чисельної густини замість того, щоб розглядати їх як відповідні функціонали. Це призводить до втрачати інформації про «колективну» поведінку системи, яка є надзвичайно важливою при описі властивостей системи в околі точок фазових перетворень другого роду.

Дж. Лебовицем та Дж. Перкусом з врахуванням нелокальних («колективних») властивостей однокомпонентної системи було отримано вираз, аналогічний (1):

$$u(\vec{r}) = \mu_0 - \mu(\vec{r}) + a \nabla^2 n(\vec{r}) \quad (2)$$

де стала a визначається через другий просторовий момент так званої прямої кореляційної функції другого порядку. Вираз (2) дозволяє в певному наближенні проводити обчислення просторового розподілу густини рідини в широкому інтервалі зміни термодинамічних параметрів, включаючи критичну точку [4].

Для побудови послідовної термодинамічної теорії, яка описувала поведінку однокомпонентної неоднорідної системи, раніше було запропоновано фундаментальний підхід, що базується на обчисленні внеску від кожного шару між еквіпотенційними поверхнями не у відповідні термодинамічні потенціали, а в гамільтоніан системи. В цьому випадку замість виразів (1) та (2) можна записати

$$u(\vec{r}) = \mu_0 - \mu(\vec{r}) + \Delta\mu_{cor}(\vec{r}), \quad (3)$$

де $\Delta\mu_{cor}$ – внесок від кореляційних ефектів, для якого було отримано вираз у вигляді нескінченного ряду:

$$\begin{aligned} \beta\Delta\mu_{cor}(\vec{r}) = & \int_V d\vec{r}_1 C_2[\Delta x(\vec{r}_1) - \Delta x(\vec{r})] + \\ & + \Delta x(\vec{r}) \int_V d\vec{r}_1 \int_V d\vec{r}_2 C_3[\Delta x(\vec{r}_1) - \Delta x(\vec{r})] + \\ & + \frac{1}{2!} \int_V d\vec{r}_1 \int_V d\vec{r}_2 C_3[\Delta x(\vec{r}_1) - \Delta x(\vec{r})] \times \\ & \times [\Delta x(\vec{r}_2) - \Delta x(\vec{r})] + \dots \end{aligned} \quad (4)$$

Для випадку достатньо плавної просторової зміни концентрації розчину $\Delta x(\vec{r})$ різницю концентрацій $\Delta x(\vec{r}_i) - \Delta x(\vec{r})$ можна розкласти у звичайний (не функціональний) ряд Тейлора за ступенями $(\vec{r}_i - \vec{r})$:

$$\begin{aligned} \beta\Delta\mu_{cor}(\vec{r}) = & \frac{1}{2} \vec{\nabla}^2 \Delta x(\vec{r}) \int_V d\vec{r}_1 C_2(\vec{r}_1 - \vec{r})^2 + \\ & + \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \Delta x(\vec{r}))^2 \int_V d\vec{r}_1 \int_V d\vec{r}_2 C_3(\vec{r}_1 - \vec{r})(\vec{r}_2 - \vec{r}) + \\ & + \vec{\nabla} \Delta x(\vec{r}) \left\{ \int_V d\vec{r}_1 C_2(\vec{r}_1 - \vec{r}) + \right. \\ & \left. + \Delta x(\vec{r}) \int_V d\vec{r}_1 \int_V d\vec{r}_2 C_3(\vec{r}_1 - \vec{r}) \right\} + \dots \end{aligned} \quad (5)$$

В цьому випадку формулу (3) можна записати у вигляді, аналогічному формулі для густини рідини (2):

$$\beta u_{BA}(\vec{r}) = \beta(\mu_0 - \mu(\vec{r})) + a \vec{\nabla}^2 \Delta x(\vec{r}) + b (\vec{\nabla} \Delta x(\vec{r}))^2 + \vec{c} \vec{\nabla} \Delta x(\vec{r}) \dots \quad (6)$$

де позначено

$$\begin{aligned} a = & \frac{1}{2} \int_V d\vec{r}_1 C_2(\vec{r}_1 - \vec{r})^2, \\ b = & \frac{1}{6} \int_V d\vec{r}_1 \int_V d\vec{r}_2 C_3(\vec{r}_1 - \vec{r})(\vec{r}_2 - \vec{r}), \\ \vec{c} = & \int_V d\vec{r}_1 C_2(\vec{r}_1 - \vec{r}) + \\ & + \Delta x(\vec{r}) \int_V d\vec{r}_1 \int_V d\vec{r}_2 C_3(\vec{r}_1 - \vec{r}). \end{aligned} \quad (7)$$

Важливим частинним випадком неоднорідної бінарної системи є система з кубічною решіткою, в якій вздовж вісі Oz діє зовнішнє поле $u(z)$, крім того, система в цьому напрямку обмежена, тому z може змінюватись в межах $[-L, L]$. В цьому випадку, очевидно, рівняння (6) можна подати у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \beta u_{BA}(z) = & \beta(\mu_0 - \mu(z)) + \\ & + a \frac{d^2}{dz^2} \Delta x(z) + b \left(\frac{d}{dz} \Delta x(z) \right)^2 + \dots \end{aligned} \quad (8)$$

Розглянемо випадок, коли бінарний розчин знаходиться в клиноподібній порі, утворений із плоскопаралельної пори шляхом повороту однієї з стінок на кут $2\varphi_{\max}$. Введемо прямокутну декартову систему координат таким чином: вісь Ox співпадає з ребром клина, вісь Oy співпадає з бісектрисою клина і спрямована від ребра клина.

Для спрощення будемо вважати, що $\varphi_{\max} \ll 1$, тому ми можемо промодельовати потенціал сил притягання (відштовхування), що діють біля стінки, наступним виразом:

$$\begin{aligned} u_A(y, z) &= B_{A1} e^{-k(\varphi_{\max} y + z)} + B_{A2} e^{-k(\varphi_{\max} y - z)} = \\ &= (B_{A1} + B_{A2}) e^{-k\varphi_{\max} y} \operatorname{ch} kz + \\ &+ (B_{A1} - B_{A2}) e^{-k\varphi_{\max} y} \operatorname{sh} kz, \\ u_B(y, z) &= B_{B1} e^{-k(\varphi_{\max} y + z)} + B_{B2} e^{-k(\varphi_{\max} y - z)} = \\ &= (B_{B1} + B_{B2}) e^{-k\varphi_{\max} y} \operatorname{ch} kz + \\ &+ (B_{B1} - B_{B2}) e^{-k\varphi_{\max} y} \operatorname{sh} kz, \end{aligned} \quad (9)$$

де B_{A1} (B_{B1}) та B_{A2} (B_{B2}) – амплітуди пристінкових потенціалів на лівій та правій межі пори для речовин А та В відповідно, k^{-1} – ефективний радіус дії цих сил.

Очевидно, що додатні значення сталих B відповідають випадку, коли біля стінки діють сили відштовхування, а від’ємні – сили притягання.

Необхідно зауважити, що значення сталих B залежать як від природи рідини (і від наявності домішок) та матеріалу стінки, що обмежує об’єм, так і від стану поверхні – якості її механічної обробки, чистоти поверхні тощо [5], а також від ступені радіаційного впливу на поверхню. Завдяки останнім факторам вона може змінюватися в дуже широких межах навіть для тієї самої речовини, тому точних даних щодо значення цих сталих не існує.

Крім того, будемо вважати, що кількість частинок N_l у шарі із сталим радіусом постійна, тобто обмежимося розглядом випадку малої зміни координати y (тобто малими значеннями кута $\varphi_{\max}$).

В цьому випадку в наближенні плавної неоднорідності, враховуючи лише перший доданок ряду (8), можна отримати диференціальне рівняння відносно $\Delta x(y, z)$:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \Delta x}{dz^2} - \kappa^2 \Delta x &= \\ &= A\kappa^2 \left((B_{BA1} + B_{BA2}) e^{-k\varphi_{\max} y} \operatorname{ch} kz + \right. \\ &\left. + (B_{BA1} - B_{BA2}) e^{-k\varphi_{\max} y} \operatorname{sh} kz + \lambda \right), \end{aligned} \quad (10)$$

де λ – стала, що залежить від параметрів критичної точки даного розчину.

Розв’язок рівняння (10) за умов трансверсальності та ізопериметризму має вигляд:

$$\begin{aligned} \Delta x(y, z) &= A\kappa^2 \times \\ &\times \left\{ - (B_{BA1} + B_{BA2}) e^{-k\varphi_{\max} y} \times \right. \\ &\times \frac{k}{\kappa k^2 - \kappa^2} \frac{\operatorname{sh} k\varphi_{\max} y}{\operatorname{sh} \kappa\varphi_{\max} y} \operatorname{ch} \kappa z - \\ &- (B_{BA1} - B_{BA2}) e^{-k\varphi_{\max} y} \times \\ &\times \frac{k}{\kappa k^2 - \kappa^2} \frac{\operatorname{ch} k\varphi_{\max} y}{\operatorname{ch} \kappa\varphi_{\max} y} \operatorname{sh} \kappa z + \\ &+ (B_{BA1} + B_{BA2}) e^{-k\varphi_{\max} y} \frac{1}{k^2 - \kappa^2} \operatorname{ch} \kappa z + \\ &+ A\kappa^2 (B_{BA1} - B_{BA2}) e^{-k\varphi_{\max} y} \frac{1}{k^2 - \kappa^2} \operatorname{sh} \kappa z + \\ &\left. + (B_{BA1} + B_{BA2}) e^{-k\varphi_{\max} y} \frac{1}{k\kappa^2 \varphi_{\max} y} \operatorname{sh} k\varphi_{\max} y \right\}. \end{aligned} \quad (11)$$

На рис. 1 – 3 наведено просторовий розподіл концентрації бінарної суміші для таких клиноподібних систем для потенціалів за різних значень амплітуд B_{BA1} та B_{BA2} (у випадку, коли біля стінки діють сили відштовхування), що відповідає розв’язку (11). Зауважимо, що аналіз наведених на рисунках даних свідчить про існування кросверної області у випадку обмеженої системи клиноподібної пори.

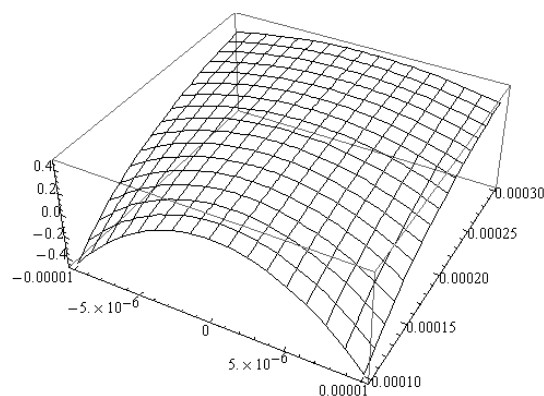


Рис. 1. Просторовий розподіл концентрації $\Delta x(y, z)$ бінарного розчину в неідеальній клиноподібній порі для системи з $\xi = 10^{-5}$ м, $k^{-1} = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $B_{BA1} = B_{BA2} = 1 \cdot 10^{-27}$ Дж, $\varphi_{\max} = 0.1$.

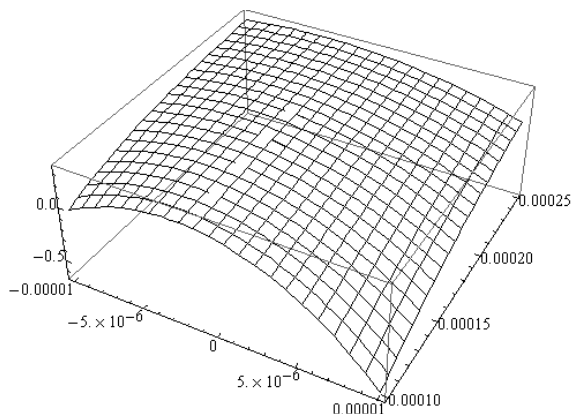


Рис. 2. Просторовий розподіл концентрації $\Delta x(y, z)$ бінарного розчину в неідеальній клиноподібній порі для системи з $\xi = 10^{-5}$, $k^{-1} = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $B_{BA1} = 1 \cdot 10^{-27}$ Дж, $B_{BA2} = 0.5 \cdot 10^{-27}$ Дж, $\varphi_{\max} = 0.1$.

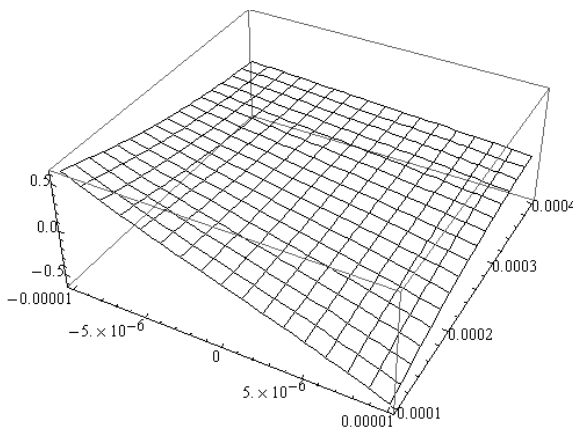


Рис. 3. Просторовий розподіл концентрації $\Delta x(y, z)$ бінарного розчину в неідеальній клиноподібній порі для системи з $\xi = 10^{-5}$, $k^{-1} = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $B_{BA1} = 0.5 \cdot 10^{-27}$ Дж, $B_{BA2} = -0.5 \cdot 10^{-27}$ Дж, $\varphi_{\max} = 0.1$.

Таким чином, отримані результати вказують на те, що в околі критичної точки розшарування наявність неідеальних стінок призводить до зміни профілю концентрації суміші в об'ємі, який визначається радіусом кореляції відповідної однорідної системи. Крім того, встановлено, що наявність стінок різної природи викликає суттєві відхилення концентрації від знайденого в локальному наближенні, що впливає на значення

критичних амплітуд, розрахованих за результатами експериментальних досліджень.

Список використаних джерел

1. Bulavin L.A., Gavryushenko D.A., Sysoev V.M. Spatial distribution of components of a binary mixture in a bounded System // Ukr. Journ. of Phys. – 2007. – Vol. 52, No 10. – P. 934-938. (in English).
2. Munster A. Chemische thermodynamik. – Berlin: Akademie, 1969, – 296 p. (In German).
3. Pokrovski A.Z., Patashinski V.L. The fluctuation theory of phase transitions. – Moscow: Nauka, 1982. – 382 p. (in Russian).
4. Bulavin L.A., Gavryushenko D.A., Sysoev V.M. Non-uniform liquid in external field // Fizika. – 1998. – A6. – P. 89-95. (in English).
5. Derjaguin B.V., Churaev N.V., Muller V.M. The surface forces. – Moscow: Nauka, 1987. – 400 p. (in Russian).

Надійшла до редколегії 01.09.2013

УДК 535.37

Гоменюк О.В.¹, к.ф.-м.н., доц.,
Шелудько В.І.¹, к.ф.-м.н., доц.,
Неділько С.Г.², д.ф.-м.н., ст.н.сп.,
Бойко В.В.³, к.ф.-м.н., доц.,
Антрапцева Н.М.³, д.х.н. проф. зав.каф.,
Вірко С.В.⁴, к.ф.-м.н., н.с.

Люмінесцентні властивості пірофосфатів цинку/мангану: $Zn_{2-x}Mn_xP_2O_7$ ($x = 0 \div 2$).

Частина 1: Безводні фосфати

Досліджено люмінесцентні властивості безводних подвійних фосфатів двовалентних металів цинку/мангану, $Zn_{2-x}Mn_xP_2O_7$ ($x = 0 \div 2$). Показано, що іони мангану, Mn^{2+} , в матриці дифосфату цинку формують три типи центрів випромінювання, де іон Mn^{2+} знаходиться в нормальному октаедричному оточенні; в октаедрах, що мають вакансії кисню, та в тетраедричному оточенні. З центрами першого типу пов'язується смуга червоного випромінювання з максимумом в околі 690 - 700 нм; центри другого типу зумовлюють довгохвильову смугу червоного випромінювання (максимум в околі 730 нм); смуга «зеленого» випромінювання (максимум в околі 450 - 470 нм) обумовлена центрами третього типу.

Ключові слова: центр люмінесценції, загасання, пастка, пірофосфат.

¹Глухівський національний педагогічний університет імені Олександра Довженка, 41400, м. Глухів, вул. Києво-Московська, 24, e-mail: gomenyuk@gmail.com

²Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр. Глушкова 4д, e-mail: SNedilko@univ.kiev.ua

³Національний університет природокористування і біоресурсів України, 03041, м. Київ, вул. Героїв Оборони, 15, e-mail: techphis_chair@twin.nauu.kiev.ua

⁴Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова НАН України, 03028, м. Київ, пр. Науки, 41.

O. V. Gomenyuk¹, PhD,
V. I. Sheludko¹, PhD,
S. G. Nedilko², Dr. Sci.,
V. V. Boyko³, PhD,
N.M. Antraptseva³, Dr. Sci.,
S. V. Virko⁴, PhD.,

The luminescence properties $Zn_{2-x}Mn_xP_2O_7$ ($x = 0 \div 2$) pyrophosphate. Part 1:

The anhydrous phosphates

Luminescence properties of two valence metals anhydrous double phosphates $Zn_{2-x}Mn_xP_2O_7$ ($x = 0 \div 2$) have been investigated. It was shown that Mn^{2+} ions form three types of the emission centers where Mn^{2+} ion can be located, first in the regular octahedral oxygen environment, second, in defect octahedra that has oxygen vacancy, and third, – in the tetrahedral oxygen environment. Red emission with peak position near 690 – 700 nm is accompanied with the first type of luminescence centers; second type of the centers determines other red luminescence (peak position is near 730 nm) and third type of the centers originates “green” emission (peak position is about 450 - 470 nm).

Key Words: luminescence centre, decay, trap, pyrophosphate.

¹Oleksandr Dovzhenko Hlukhiv national pedagogical university, 41400, Hlukhiv, Kyievo-Moskovs'ka str., 24, e-mail: gomenyuk@gmail.com

²Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: SNedilko@univ.kiev.ua

³National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine, 03041, Kyiv, Heroiv Oborony st., 15, e-mail: techphis_chair@twin.nauu.kiev.ua

⁴V.Ye. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of NAS of Ukraine, 03028, Kyiv, pr. Nauki, 41.

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

Індивідуальні дифосфати цинку ($Zn_2P_2O_7$), мангану ($Mn_2P_2O_7$) та магнію ($Mg_2P_2O_7$) відомі своїми практичними застосуваннями. На їх основі виготовляють термостійкі пігменти,

каталізатори, тверді електроліти, антикорозійні рідини і т. д. [1, 2]. Відомими є і їхні оптичні властивості [3, 4]. Дифосфати, які мають в своєму складі одночасно цинк і манган (магній), вміст яких можна контролювано змінювати,

мають в порівнянні з індивідуальними дифосфатами інші, для певних цілей - покращенні фізико-хімічні, а відповідно і експлуатаційні характеристики. Очевидно, їх оптичні, зокрема, люмінесцентні властивості також мають відрізнятися від характеристик індивідуальних дифосфатів.

Важливим аспектом є те, що дифосфати цинку допускають введення до їх складу мангану у широкому діапазоні – аж до повної заміни ним іонів цинку, крім того, сполуки $Zn_2P_2O_7$ та тверді розчини $Zn_{2-x}Mn_xP_2O_7$ можуть існувати не тільки у вигляді безводних сполук, а і у вигляді гідратів, причому з різним x , що дуже важливо, контрольованим вмістом молекул води, що можуть модифікувати оптичні властивості дифосфатів двовалентних металів.

Відомості щодо структури, хімічних і фізичних властивостей дифосфатів, в складі яких одночасно є два катіони, Zn і Mn (Mg), стосуються, в основному, безводних твердих розчинів дифосфатів або ж гідратованих подвійних солей на основі одно- і двовалентного металу [5 – 7]. Дані щодо гідратованих твердих розчинів дифосфатів, зокрема, цинку й мангану (магнію) у літературі відсутні. Тому результати наших досліджень можуть мати не тільки самостійний інтерес з позиції фізики люмінесцентних процесів в таких матеріалах, але і як нові дані щодо структури гідратів подвійних фосфатів цинку/мангану.

Виходячи з вище розглянутого, в першій частині цієї роботи ми дослідили люмінесцентні властивості безводних подвійних фосфатів двовалентних металів цинку/мангану $Zn_{2-x}Mn_xP_2O_7$ ($x = 0 \div 2$), а вплив на ці властивості молекул води (в одно- та п'ятигідратах $Zn_{2-x}Mn_xP_2O_7$, та відповідно, буде розглянуто в її другій частині).

Експериментальні методи та обладнання для експериментальних досліджень

З'ясування умов синтезу концентраційної серії вказаних дифосфатів виконувалися із застосуванням методу остаточних концентрацій. В якості вихідних реагентів використовувалися водні розчини сульфатів $ZnSO_4 \cdot 7H_2O$, $MnSO_4 \cdot 5H_2O$ та дифосфату $K_4P_2O_7$ марки "ч.д.а". Як оптимальні були взяті наступні співвідношення у складі реагентів: $P_2O_7^{4-}/(Zn^{2+} + Mn^{2+}) = 0,2$; $k = Zn/Mn$ змінювали в межах 5,67–0,8.

Безводні кристали отримувались шляхом нагрівання синтезованих пентагідратів до температур $T = 853$ К.

Люмінесценція досліджувалась при $T = 4,2, 77$ та 300 К. Зразки розміщувались в гелієвому або азотному кріостатах, в рідкому гелії або азоті при температурі зразків 4,2 або 77 К відповідно. Люмінесценцію збуджували випромінюванням лазера ИЛГИ-501 (довжина хвилі збудження $\lambda_{36} = 337,1$ нм) та випромінюванням ксенонової лампи ДКЕЕЛ-1000 (область довжин хвиль збудження 300 – 650 нм), яке розкладали в спектр за допомогою подвійного призмового монохроматора ДМР – 4. Спектрометр ДФС – 12 (обернена лінійна дисперсія 10 Å/мм) використовували для реєстрації спектрів люмінесценції.

Спектри люмінесценції при збудженні в області вакуумного ультрафіолету та спектри збудженні в цій області вимірювались на станції SUPERLUMI синхротрону DESY в м. Гамбург (Німеччина). Спектри люмінесценції записувалися в діапазоні довжин хвиль 275 – 950 нм і спектри збудження люмінесценції – в діапазоні 50 – 334 нм при температурах $T \cong 10$ і 300 К.

Спектри рентгенолюмінесценції реєструвались при одночасному опроміненні неперервним рентгенівським джерелом приблизно на протязі 1200 с, при кімнатній температурі і при температурі рідкого азоту ($T = 300$ і 77 К відповідно).

Експериментальні результати та їх обговорення

Люмінесцентні властивості кристалів дифосфатів двовалентних металів $Zn_{2-x}Mn_xP_2O_7$ вивчалися в широкій області довжин хвиль збудження, $\lambda_{36} = 50 - 630$ нм, і при температурах від 4,2 до 300 К. В спектрах фотолюмінесценції (ФЛ) індивідуального дифосфату цинку, $Zn_2P_2O_7$, при $T = 300$ К спостерігається широка складна смуга синьо – рожевого випромінювання з максимумом обвідної в околі 475 нм (рис. 1, крива 1).

З появою мангану у складі сполуки інтенсивність ФЛ падає більше ніж в 2 рази. При цьому зростає відносна інтенсивність довгохвильової сторони спектра ФЛ в області 500 - 600 нм, а в діапазоні, 600 - 750 нм, з'являється неявно виражений компонент спектра (рис. 1, крива 2). При подальшому збільшенні вмісту Mn ($x > 1$) інтенсивність довгохвильової частини спектра ФЛ падає і для сполуки $Mn_2P_2O_7$ спектр має максимум при 450 - 470 нм (рис. 1, крива 3).

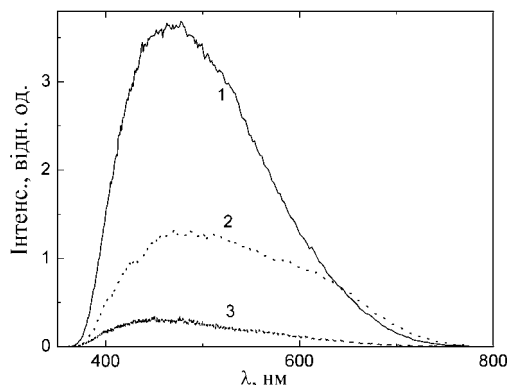


Рис. 1. Спектри ФЛ $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7$ (1), $\text{Zn}_{1.04}\text{Mn}_{0.96}\text{P}_2\text{O}_7$ (2), $\text{Mn}_2\text{P}_2\text{O}_7$ (3), $T = 300 \text{ K}$, $\lambda_{36} = 337,1 \text{ nm}$.

Пониження температури зразків від кімнатної до 77 K супроводжується помітним (~ 6 разів) спадом інтенсивності описаної короткохвильової ФЛ, однак, водночас, в довгохвильовій області випромінювання з'являється інтенсивна смуга червоного випромінювання з максимумом, λ_m , в околі 690 nm (рис. 2).

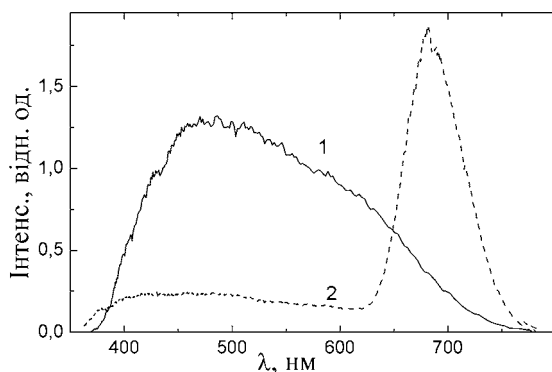


Рис. 2. Спектри ФЛ кристалів $\text{Zn}_{1.04}\text{Mn}_{0.96}\text{P}_2\text{O}_7$. $T = 300$ (1) і 77 K (2), $\lambda_{36} = 337,1 \text{ nm}$.

Смуга червоного випромінювання переважає в спектрах випромінювання фосфату $\text{Zn}_{1.04}\text{Mn}_{0.96}\text{P}_2\text{O}_7$ не тільки при фотозбудженні. В спектрах рентгенолюмінесценції (РЛ) при низьких температурах інтенсивність червоної смуги переважає інтенсивність короткохвильової в ~ 100 разів, а при кімнатній температурі ця смуга, як і при фотозбудженні, – відсутня (рис. 3). При збудженні жорстким, вакуумним ультрафіолетом вона домінує в спектрах люмінесценції в усьому діапазоні температур: $4,2 - 300 \text{ K}$ (рис. 3).

Залежність $I(\text{РЛ})$, від часу опромінення зразків рентгеновським випромінюванням порівняно не сильно залежить від типу сполуки, якщо зразки опромінюються при $T = 77 \text{ K}$ (рис. 4, криві 2, 3, 5), і досить сильно змінюється в залежності від

складу сполуки, якщо зразки опромінюються при кімнатній температурі (рис. 4, криві 1, 4).

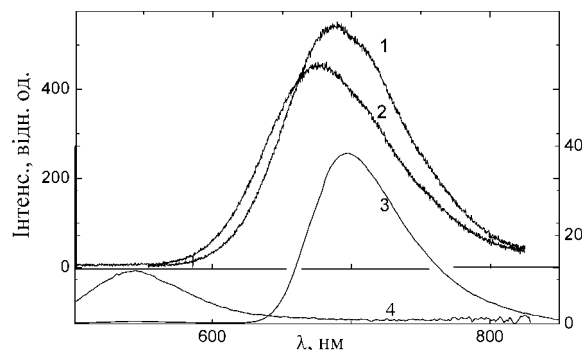


Рис. 3. Спектри люмінесценції при ВУФ збудженні (1, 2; $\lambda_{36} = 170 \text{ nm}$) та спектри РЛ (3, 4) сполуки $\text{Zn}_{1.04}\text{Mn}_{0.96}\text{P}_2\text{O}_7$; $T = 10$ (1) і 300 (2) та 77 (3) і 300 K (4).

При кімнатній температурі опромінення світлосума накопичується значно сильніше у випадку індивідуального фосфату цинку (крива 1), ніж у випадку подвійного фосфату $\text{Zn}_{1.04}\text{Mn}_{0.96}\text{P}_2\text{O}_7$ (рис. 4, крива 4).

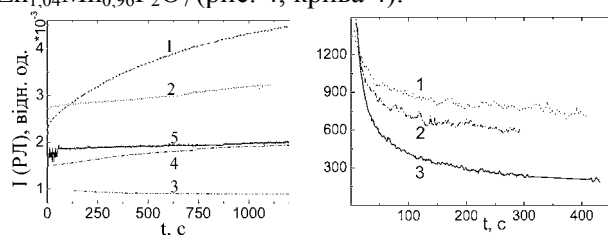


Рис. 4. Криві $I(\text{РЛ})$ для сполук $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7$ (1, 2), $\text{Zn}_{1.04}\text{Mn}_{0.96}\text{P}_2\text{O}_7$ (3, 4) та $\text{Mn}_2\text{P}_2\text{O}_7$ (5) в залежності від часу опромінення, $T = 300$ (1, 4) і 77 K (2, 3, 5).

Рис. 5. Криві фосфоресценції сполук $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7$ (1, 2), $\text{Zn}_{1.04}\text{Mn}_{0.96}\text{P}_2\text{O}_7$ (3); $T = 300$ (1) і 77 K (2, 3).

Дані рис. 4 корелюють із даними щодо впливу температури на швидкість загасання фосфоресценції: з пониженням температури зразків $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7$ від кімнатної до 77 K загасання фосфоресценції відбувається швидше (рис. 5, криві 1, 2). Заміна атомів цинку на манган також призводить до більш швидкого загасання свічення (рис. 5).

Наведені дані свідчать, що пастки, відповідальні за запасаєння світлосуми, як в нелегованих, так і в легованих манганом сполуках, є відносно мілкими: пониження температури до 77 K уже сильно зменшує імовірність звільнення з них носіїв. Крім того, з цих даних випливає, що іони мангану створюють нові рівні захоплення, а також ефективно

взаємодіють з пастками і частину електронів із заповнених пасток вивільняють на себе, перекриваючи, тим самим канал їх переходу на центри власного випромінювання матриці.

Результати досліджень кривих термостимульованої люмінесценції (ТСЛ) узгоджуються із наведеними вище даними щодо поведінки кривих запасання світлосуми, кривих загасання фосфоресценції, спектрами РЛ та спектрами свічення при збудженні вакуумним ультрафіолетом. Дійсно, якщо для індивідуального фосфату $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7$ спостерігається два чітких піки при 140 та 184 К в низькотемпературній частині кривої ТСЛ і два невеликої інтенсивності піки в області високих температур при 265 і 295 К, то для твердого розчину $\text{Zn}_{1,04}\text{Mn}_{0,96}\text{P}_2\text{O}_7$ спектр пасток є подібним, але значною мірою неоднорідно розширеним: в спектрі ТСЛ спостерігається широка смуга, яка знаходиться в тому ж діапазоні температур 100 - 250 К, а тому її можна розглядати як утворену суперпозицією згаданих вище піків, але за умови їх енергетичної неоднорідності. Крім того для подвійного фосфату додаються і деякі нові піки. Це, очевидно, як пік в області низьких, ~ 120 К, так і особливо піки при більш високих температурах, зокрема, в околі 160 та 210 К. В результаті крива ТСЛ в цілому зміщується в область більш високих температур (рис. 6).

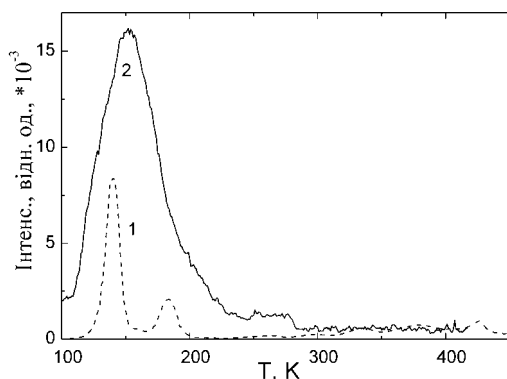


Рис. 6. Криві ТСЛ сполук $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7$ (1) та $\text{Zn}_{1,04}\text{Mn}_{0,96}\text{P}_2\text{O}_7$ (2)

Для ТСЛ монофосфату цинку можна провести елементарні оцінки глибини рівнів захоплення, яким відповідають піки ТСЛ при 140 та 184 К.

Аналіз форми цих піків показує, що вони є більш протяжними з боку низьких температур, що, як відомо, є ознакою, так званої, лінійної кінетики ТСЛ (імовірність повторного захоплення електронів на пастки багато менша імовірності їх рекомбінації на центрах свічення).

З врахуванням цієї обставини глибину пастки E_t можна оцінити за відомою елементарною формулою [8]:

$$E_t = \frac{2T_m^2}{\delta},$$

де T_m - положення максимуму, а δ - напівширина піка кривої ТСЛ. Одержані за цією формулою значення складають ~ 2100 і 2500 cm^{-1} , відповідно для піків при $T = 140$ і 184 K . Як відомо, наведена вище формула для E_t дає значення, завищені на 20 - 40 % порівняно із реальними, а отже і дійсні величини E_t слід оцінювати значеннями 1500 - 1750 та 1780 - 2080 cm^{-1} .

Таким чином, обидва типи сполук, без мангану та з манганом, мають дуже подібну систему дефектів (пасток). Ця система, очевидно, є досить складною, що зумовлює різний відгук сполуки певного складу на збудження різного типу. Так, енергія близького ультрафіолету (наприклад, 337,1 нм), в сполуках з манганом при низьких температурах ефективніше потрапляє до центрів червоного свічення, ніж до центрів власного свічення, і тому в спектрах ФЛ при низьких температурах спостерігається тільки червона смуга, тоді як при температурах порядку кімнатної її інтенсивність дуже незначна (див. рис. 1 та рис. 2). При високоенергетичному ВУФ збудженні, яке, очевидно, викликає міжзонні переходи, в спектрах легованих сполук, незалежно від температури зразків, в основному, виявляють довгохвильову червону смугу випромінювання, а свічення матриці – відсутнє. Очевидно, за умови низьких температур, як при «низькоенергетичному» УФ збудженні, коли вільні носії зарядів не утворюються, так і при ВУФ збудженні енергія збудження від матриці ефективно передається до домішкових іонів мангану, («пряме» збудження центрів червоної люмінесценції також, можливо, має місце). Із цього випливає, що при УФ та ВУФ збудженнях в люмінесцентних процесах беруть участь дефекти, які безпосередньо взаємодіють із центрами червоної люмінесценції. Це, однак, мають бути дефекти різного типу, які відрізняються положенням енергетичних рівнів. Ті із них, що формують глибокі рівні, є більш ефективними при ВУФ збудженні, а дефекти із мілкими рівнями актуальні при УФ збудженні. За наявності мангану, при низьких температурах, енергія збудження від дефектів передається переважно на центри люмінесценції, пов'язані саме із іонами мангану і тільки при підвищенні температури до кімнатної енергія збудження

дефектної матриці передається і до центрів власного свічення. Розташування рівнів дефектів на різній глибині зумовлює різну температурну поведінку червоної люмінесценції в залежності від типу збудження: «високоенергетичне» ВУФ чи «низькоенергетичне» УФ збудження. В результаті, при УФ збудженні червона люмінесценція швидко загасає з підвищенням температури, при ВУФ збудженні - загасання є повільним. Описані вище зміни кривих ТСЛ, (рис. 6), показали, що в результаті легування фосфату цинку іонами мангану генеруються пастки з більш глибокими рівнями. При рентгенівському збудженні, утворені вільні носії зарядів, очевидно, більш ефективно захоплюються пастками, безпосередньо зв'язаними із іонами мангану ніж з центрами власного свічення, внаслідок чого при низьких температурах інтенсивність червоної люмінесценції значно переважає інтенсивність власного свічення. Глибина цих пасток як показали наведені вище результати розрахунків є як раз такою, що може забезпечувати при кімнатній температурі сильне загасання червоної РЛ і посилення власної РЛ (рис. 3).

Введення іонів мангану до складу дифосфату цинку призводить до змін, очевидно, не тільки в ансамблі дефектів кристалічної решітки. Наведені дані свідчать, що на основі іонів мангану формуються нові, домішкові, центри люмінесценції з якими слід асоціювати смуги випромінювання в діапазоні 450 – 650 нм, (див. рис. 1 та рис. 2), та смугу червоного випромінювання з максимумом в околі 700 нм (див. рис. 2 та рис. 3). Дійсно, є загальновідомим, що «зелене» свічення в діапазоні 400 - 600 нм в сполуках, які містять домішковий манган, або манган, що входить до їх складу, можуть спричиняти двозарядні іони Mn^{2+} у кисневому оточенні близькому до тетраедричного, а іони Mn^{2+} , які знаходяться в октаедричному кисневому оточенні, характеризуються червоною люмінесценцією в діапазоні 600 - 800 нм [1-6]. В складних матрицях, до складу яких входять комплексні оксидні молекулярні аніони, інколи одночасно виявляють центри обох типів. Наведені вище дані вказують на можливість реалізації такої ситуації і для досліджених нами фосфатів.

Можливість одночасного формування на основі іонів мангану центрів різного типу - в октаедричному та тетраедричному оточенні, впливає із даних щодо структури дифосфатів цинку та мангану. Вважається, що в $Zn_2P_2O_7$

координаційне число для цинку дорівнює 5 або 6 [9]. Подібну невизначеність можна розглядати як наслідок існування в матриці дифосфату цинку поліедрів, що містять іони цинку, переважно, із кількістю атомів кисню: чотири та шість. Таку можливість, на наш погляд, обумовлено уже вихідною будовою решітки кристала $Zn_2P_2O_7$, в якій існує два нееквівалентних атоми цинку і, якщо один із них має здатність легше ніж інший втрачати два атоми кисню, то в решітці будуть існувати кисневі поліедри переважно двох типів. Не виключено, що певною мірою в структурі решітки представлено і поліедри з п'ятьма атомами кисню, які можна розглядати як дефектні октаедри.

Якщо іони мангану в оточенні чотирьох атомів кисню, є центрами «зеленої» люмінесценції, то характеристики свічення тих, що знаходяться в середині поліедрів із п'яти киснів, можуть бути близькими до характеристик октаедричних центрів. Аналіз червоної люмінесценції підтверджує, що спостережене нами червоне випромінювання дійсно є складним.

По - перше, на це вказує різна температурна поведінка червоного випромінювання в залежності від типу збудження: УФ, ВУФ або ж рентгенівське. По - друге, смуги цього випромінювання при різного типу збудженнях хоча і мають дуже близькі положення максимумів, однак форма смуг помітно відрізняється. Так, при ВУФ збудженні, контур смуги (крива 1 на рис. 3) описується однією широкою ($\delta = 1770 \text{ cm}^{-1}$) гаусової форми кривою з $\nu_m = 14370 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda_m = 696 \text{ nm}$); УФ збудження призводить до асиметричної кривої (крива 2 на рис. 2) в якій домінує значно вузький ($\delta = 1120 \text{ cm}^{-1}$) компонент гаусової форми з $\nu_m = 14580 \text{ cm}^{-1}$ ($\sim 686 \text{ nm}$), із доданком ще одного довгохвильового контуру: $\nu_m = 13700 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda_m = 730 \text{ nm}$); $\delta = 640 \text{ cm}^{-1}$). В спектрі при рентгенівському збудженні (крива 3 на рис. 3) також маємо суму двох гаусових контурів з максимумами при 14425 cm^{-1} (693 nm) та 13690 cm^{-1} (730 nm) і напівширинами 990 та 1490 cm^{-1} . Розклад згаданих спектрів на складові показано на рис. 7.

Формування поліедрів з кількістю атомів кисню менше шести означає існування в решітці кристалів певної кількості кисневих вакансій, які можуть бути ядрами центрів власної люмінесценції дифосфатів. З наведених даних зрозуміло, що співвідношення кількості дефектів та домішкових центрів випромінювання зумовлених манганом, має впливати на люмінесцентні характеристики досліджених сполук. Важливим є і сам тип дефекту, від якого

може залежати конкурентноспроможність каналів передачі енергії збудження: до центрів власного свічення (загасання), чи то до центрів домішкової люмінесценції.

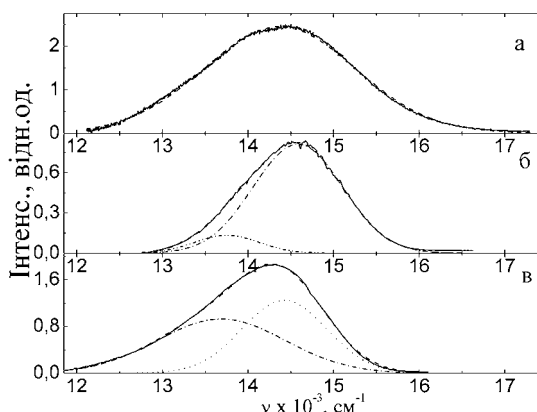


Рис. 7. Розклад спектрів люмінесценції на гаусові складові: а) при УФ збудженні: спектр 2 з рис. 2; б) при ВУФ збудженні: спектр 1 з рис. 3; в) при рентгенівському збудженні: спектр 3 з рис. 3.

Висновки

Наведені результати дозволяють стверджувати, що домішкові іони мангану, Mn^{2+} , в матриці дифосфату цинку формують три типи центрів випромінювання: Mn^{2+} в октаедричному оточенні, таких центрів має бути переважна більшість; іони Mn^{2+} з дефектами у вигляді

вакансій кисню в їх октаедричному оточенні, та іони Mn^{2+} в тетраедричному оточенні. З центрами першого типу пов'язується смуга червоного випромінювання з максимумом в околі 690 - 700 нм, яка переважає в усіх наведених спектрах; центри другого типу зумовлюють довгохвильову смугу червоного випромінювання (максимум в околі 730 нм); смугу «зеленого» випромінювання слід співставляти із центрами третього типу. Дефекти іншого типу ніж кисневі вакансії у першій координаційній сфері іонів мангану та віддалені дефекти, очевидно, спричиняють неоднорідне розширення смуг червоного випромінювання.

Одним із чинників, що можуть впливати на характеристики процесів люмінесценції, безумовно, можуть бути молекули води, атоми яких можуть входити до найближчого оточення двовалентного металу решітки. Тому в частині 2 цієї роботи буде розглянуто основні прояви впливу води на люмінесцентні властивості сполук $Zn_{2x}Mn_xP_2O_7$.

Автори висловлюють вдячність д.ф.-м.н.п.н.с. кафедри експериментальної фізики В. Я. Дегоді за допомогу у проведенні вимірювання характеристик РЛ та ТЛ досліджених матеріалів.

Список використаних джерел

1. Arthur L. Smith. Luminescence of three forms of Zinc Orthophosphate: Mn // J. of the Electrochemical Society. – 1951. – V. 98, № 9. – P. 363–368.
2. B. Han, R. Y. Korotkov, B. W. Wessels, M. P. Ulmer Optical properties of Mn^{4+} ions in GaN:Mn codoped with Mg acceptors // Applied Physics Letters. – 2004. – V. 84, Is. 26. – P. 5320–5322.
3. Muuga I. A., Lushchik N. E. The sensitized luminescence of the $Ca_3(PO_4)_2$ - Ga, Mn and $Ca_3(PO_4)_2$ -In, Mn // Research on the luminescence / Proceedings of the Institute of Physics and Astronomy, Academy of Sciences of the Estonian SSR / Tartu. – 1962. – V. 21. – P. 51. (in Russian).
4. Lakshmana Rao J., B. Deva Prasad Raju, N. O. Gopul, K. V. Narasimhulu Electron paramagnetic resonance and optical absorption studies on Mn^{2+}

ions doped in $KZnClSO_4 \cdot 3H_2O$ single crystals // Physica B. – 2005. – V. 355. – P. 207–215.

5. Patra A., Gary A. Baker, Sheila N. Baker Effects of dopand concentration and annealing temperature on the phosphorence from $Zn_2SiO_4:Mn^{2+}$ nanocrystals // Journal of Luminescence. – 2005. – V. 111. – P. 105–111.

6. Fuhai Su, Baoshan Ma, Kun Ding [et al.] Luminescence temperature and pressure studies of Zn_2SiO_4 phosphors doped with Mn^{2+} and Eu^{3+} ions // Journal of Luminescence. – 2006. – V. 116. – P. 117–126.

7. Crispin Calvo. The crystal structure and phase transitions of β - $Zn_2P_2O_7$ / Crispin Calvo // Canad. J. of Chem. – 1965. – V. 43. – P. 1147–1153.

8. Kaminskiy A. A. The laser crystals – Moscow: Nauka, 1975. – 268 p. (in Russian).

9. Constant Z. A. Divalent metal phosphates – Riga: Zinatne, 1987. – 371 p. (in Russian).

Надійшла до редколегії 11.10.13

УДК 681.3.062

Горбар Е. В.¹, д.ф.-м.н., с.н.с.

Кіральний ефект розділення в релятивістській матерії в зовнішньому магнітному полі у просторі з границями

Розглянуто кіральний ефект розділення в релятивістській матерії в зовнішньому магнітному полі у просторі з границями. Отримано систему диференціальних рівнянь чий розв'язки повинні описувати рівноважний стан системи.

Ключові слова: аксіальний струм, магнітне поле, релятивістська матерія, границя

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр. Глушкова 4д, e-mail: gorbar@bitp.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Recently there was a significant interest in high energy physics community to the role of quantum anomalies in transport and electromagnetic properties of relativistic matter connected with the existence in magnetized relativistic matter nondissipative electric and axial currents. Historically, the first example of a nondissipative current was revealed in Ref.[1], where it was shown that the ground state of the system of free relativistic fermions in a magnetic field is characterized by the presence of an axial current. Later it was argued [2,3] that the existence of this current is closely related to the chiral anomaly. This effect is known in the literature as the chiral separation effect (CSE) (for a brief review, see Ref.[4]).

Using the chiral anomaly, it was suggested in Refs.[5,6,7] that there exists a nondissipative electric current in magnetized relativistic matter with chiral chemical potential. This phenomenon is known as the chiral magnetic effect (CME). Further, it was argued in [5,6] that the chiral magnetic effect may lead to charge-dependent correlations in heavy-ions collisions and flow. These correlations are experimentally observed at RHIC and appear to be in a qualitative agreement with the predictions of the CME.

The CSE and CME were studied in the literature in a space without boundaries. Still all realistic laboratory and astrophysical systems have a finite volume. Therefore, it is interesting to consider these

E. V. Gorbar¹, Dr. Sci., Sen. Sci. Res.

Chiral separation effect in magnetized relativistic matter in space with boundaries

The chiral separation effect in relativistic matter in a magnetic field is considered in space with boundaries. A system of differential equations whose solution should describe equilibrium state of the system is obtained.

Key Words: axial current, magnetic field, relativistic matter, boundary

¹Department of Physics, Taras Shevchenko National Kyiv University, 03680, Kyiv, Glushkov st. 4d, e-mail: gorbar@bitp.kiev.ua

effects in a space with boundaries. This problem provides a motivation for the study of the CSE in a space with boundaries in this paper. We will consider QED matter within two planes $z = a/2$ and $z = -a/2$.

If the planes are absent and matter fills the whole space, then there is an axial current [1,2,3]

$$\langle j_5^3 \rangle_0 = -\frac{eB\sqrt{\mu^2 - m^2}}{2\pi^2}, \quad (1)$$

where μ is chemical potential, m is the electron mass, and B the strength of magnetic field pointed in the $+z$ direction. A constant chiral current defines a steady flow from $-\infty$ to $+\infty$ in the z direction in infinite space. Obviously, such a steady flow is impossible in a finite domain. For example, chiral charge in our model would continuously increase at the plane $z = -a/2$ and decrease at $z = a/2$. Then it is natural to assume that there appears an excess and deficit of chiral charge near the boundaries $z = -a/2$ and $z = a/2$. One can describe this excess and deficit of chiral charges by adding the chiral chemical potential term in the effective Lagrangian $\mu_5 \bar{\psi} \gamma^0 \gamma^5 \psi$. One may expect that, in general, chemical potential should depend on z in the problem under consideration.

Physically, it is clear that if there is an influx of chiral charge near boundary, there should be some mechanism to remove this charge for the system to be in equilibrium state. Mathematically, we should check that the continuity equation for the axial current

$$\partial_\mu \langle j_5^\mu \rangle = 2m \langle i\bar{\psi}\gamma^5\psi \rangle + \frac{e^2 \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}}{2\pi^2} \quad (2)$$

is satisfied everywhere including regions near boundaries. The last term on the right-hand side of Eq.(2) is due to the chiral anomaly. Naively, since the mass term breaks chiral symmetry, one would think that the continuity equation (2) may be easily satisfied near boundaries due to the first term on its right-hand side proportional to m . Still it is not difficult following the procedure in Appendix A in Ref.[8] to derive the fermion propagator taking into account non-zero fermion mass and chiral chemical potential. Then one may check by multiplying the fermion propagator by γ^5 and taking trace that the first term on the right-hand side does not contribute.

Fortunately, there is another possibility to satisfy the continuity equation near boundaries due to the second term on the right-hand side of Eq.(2). For this electric fields should be generated near boundaries. There exists a natural possibility to generate these fields connected with the CME. As we discussed above, an excess or deficit of chiral charge near boundaries means that chiral chemical potential is non-zero in these regions. According to the CME, this leads to the corresponding electric currents in these regions. Then the continuity equation for axial current (2) may be satisfied.

Thus, it is clear that in order to describe the CSE in a space with boundaries, the following system of equations for the Dirac fermion function $\psi(z)$, zero component of electromagnetic field $A_0(z)$, and chiral chemical potential $\mu_5(z)$ should be solved

$$i\gamma^3\psi'(z) + m\psi(z) =$$

$$(E - eA_0(z) + \mu - \mu_5(z)\gamma^5)\gamma^0\psi(z), \quad (3)$$

$$\frac{A_0''(z)}{e} = \langle \bar{\psi}\gamma^0\psi \rangle - \langle \bar{\psi}\gamma^0\psi \rangle|_{A_0=\mu_5=0}, \quad (4)$$

$$\partial_z \langle \bar{\psi}\gamma^3\gamma^5\psi \rangle = 2m \langle i\bar{\psi}\gamma^5\psi \rangle$$

$$+ \frac{e^2 B A_0'(z)}{2\pi^2}. \quad (5)$$

In order to finish the setup of the problem, we should specify the boundary conditions for the system of differential equations (3)-(5). Unfortunately, as is well known from the studies in the MIT bag model [9], there is no boundary condition for the fermion field which is chiral symmetry invariant. Since we consider the chiral separation effect and study axial current, chiral symmetry is crucial for us. Relativistic QED matter occurs naturally in compact stars, where it is held in a finite volume due to the gravitational force. Since the gravitational interaction with fermions is chiral invariant, we may invoke external gravitational field in order to provide a chiral invariant boundary condition for the fermion field. It remains to be seen whether the system of equations (3)-(5) with the corresponding boundary conditions admits solution that describes equilibrium state in the CSE in space with boundaries.

References

1. Vilenkin A. Equilibrium parity-violating current in a magnetic field / A. Vilenkin // Physical Review D. – 1980. – Vol.22. – P. 3080-3084.
2. Metlitski M.A. Anomalous axion interaction and topological currents in dense matter / M.A. Metlitski and A.R. Zhitnitsky // Physical Review D. – 2005. – Vol. 72. – P.045011.
3. Newman G.M. Response of strongly-interacting matter to magnetic field: some exact results / G.M. Newman and D. Son // Physical Review D. – 2006. – Vol.73. – P. 045006.
4. Fukushima K. Views of the chiral magnetic effect / K. Fukushima // Lect. Notes Phys. – 2013. – Vol.871. – P. 241-259.
5. Kharzeev D. Charge separation induced by P-odd bubbles in QCD matter / D. Kharzeev and A. Zhinitsky // Nucl. Phys. B. – 2007. – Vol. 797. – P. 67-79.
6. Kharzeev D. The effects of charge change in heavy ion collisions: “Event by event P and CP violation” / D. Kharzeev, L.D. McLerran, and H. J. Warringa // Nucl. Phys. B. – 2008. – Vol. 803. – P. 227-253.
7. Fukushima K. The chiral magnetic effect / K. Fukushima, D. Kharzeev, and H.J. Warringa // Phys. Rev. D. – 2008. – Vol. 78. – P. 074033.
8. Gorbar E.V. Normal ground state of dense relativistic matter in a magnetic field / E.V. Gorbar, V.A. Miranky, and I.A. Shovkovy // Phys. Rev. D. – 2011. – Vol. 83. – P. 085003.
9. Chodos A. New extended model of hadrons / A. Chodos, R.L. Jaffe, C.P. Torn, and V. Weisskopf // Phys. Rev. D. – 1974. – Vol. 9. – P. 3471-3495.

Надійшла до редколегії 21.10.2013

УДК 535.34; 535.016; 538.97

Єщенко О.А.¹, д.ф.-м.н., доц.

Оптична анізотропія шаруватих метал-діелектричних наноструктур на основі щільних 2D-масивів наночастинок срібла

У роботі теоретично досліджено просторову та поляризаційну анізотропію спектрів екстинкції системи паралельних щільних 2D-моношарів наночастинок Ag, розділених діелектричними плівками. Показано, що зміна кута падіння та/або азимутального кута поляризації падаючого світла приводить до сильних змін спектрального положення, півширини та інтенсивності смуг екстинкції таких структур. Отримані залежності інтерпретовано як результат колективізації поверхневих плазмонних мод, яка є результатом сильної диполь-дипольної взаємодії наночастинок срібла.

Ключові слова: моношари наночастинок срібла, диполь-дипольна взаємодія, колективізація поверхневих плазмонних мод.

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: yes@univ.kiev.ua

O. A. Yeshchenko¹, Dr. Sci., Assoc. Prof.

Optical anisotropy of layered metal-dielectric nanostructures based on dense 2D-arrays of silver nanoparticles

The spatial and polarization anisotropy of extinction spectra of parallel dense 2D-monolayers of Ag nanoparticles separated by dielectric films is theoretically studied. It is shown that the change in the angle of incidence and/or azimuth angle of polarization of incident light leads to strong changes in the spectral position, half-width and intensity of the extinction bands of such structures. The dependences are interpreted as a result of collectivization of surface plasmon modes occurring due to strong dipole-dipole coupling of interacting silver nanoparticles.

Key Words: monolayers of silver nanoparticles, dipole-dipole coupling, collectivization of surface plasmon modes.

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, Physics Depart., 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: yes@univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Єжов С.М.

Вступ

Як відомо, оптичні властивості металевих наночастинок та метал-діелектричних нанокомпозитів на їх основі у видимому діапазоні зумовлені збудженням у металі поверхневих колективних когерентних коливань вільних електронів, так званих поверхневих плазмонів [1,2]. В одній ізольованій наночастиці металу область локалізації поверхневих плазмонів в більшій чи меншій мірі співпадає з об'ємом, що вона займає. Плазмонні хвильові функції окремих наночастинок і спектр їх плазмових коливань в цілому схожі на хвильові функції атомів і молекул і тому металеві наночастинок можна назвати плазмонними атомами.

При збільшенні концентрації наночастинок у композиті взаємодія між ними збільшується і, коли відстань між ними стає порядку їх розміру або менше, більш доцільно говорити про кластери наночастинок, а не про окремі наночастинок. Основною тенденцією сучасних

нанотехнологій є необхідність помістити в заданому об'ємі якомога більше елементів (високий ступінь інтеграції), у результаті чого ці елементи виявляються розташованими на близькій відстані і, як результат, взаємодія між ними стає сильною. Отже, кластери наночастинок (плазмонних атомів) є широко розповсюдженим об'єктом сучасних досліджень. Крім того, в природі часто відбуваються процеси самоорганізації наночастинок, у результаті чого окремі наночастинок утворюють більш-менш упорядковані структури, які також доцільно описувати в термінах кластерів або масивів (граток) наночастинок.

З фундаментальної та практичної точок зору цікавість і важливість плазмонних властивостей кластерів наночастинок пов'язана з тим, що в кластерах, на відміну від окремих наночастинок, є, принаймні, два розмірні параметри: розмір наночастинок і відстань між ними. Зміна будь-якого з цих параметрів призводить до істотної зміни плазмонних властивостей наночастинок і

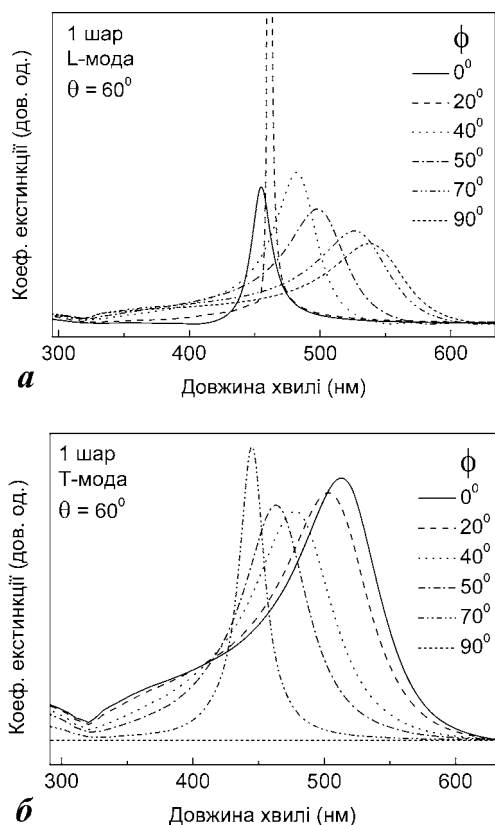


Рис. 1. Поведінка спектрів екстинкції моношару наночастинок срібла, зумовлених збудженням у ньому колективних L (а) та Т (б) поверхневих плазмонних мод при зміні азимутального кута поляризації ϕ . Кут падіння $\theta = 60^\circ$.

дозволяє ефективно керувати їх плазмонними властивостями, зокрема їх енергетичним спектром. Така гнучкість приводить до можливості побудови найрізноманітніших нанопристроїв. Проте, крім “внутрішніх” параметрів кластерів наночастинок є також “зовнішні” параметри, змінюючи які можна керувати оптичними властивостями кластерів наночастинок. Такими параметрами є кут падіння світлового пучка та його поляризація.

Нижче теоретично проаналізовано вплив кута падіння та азимутального кута поляризації світлового пучка на спектри екстинкції (послаблення) метал-діелектричних композитів, які являють собою систему кількох паралельних щільних моношарів наночастинок срібла, розділених діелектричними плівками. Показано, що взаємодія між наночастинок в межах моношару та між частинками різних шарів зумовлює колективізацію поверхневих плазмонних мод, що, в свою чергу, суттєво

впливає на плазмонний енергетичний спектр таких структурах, а отже і на їх оптичні властивості.

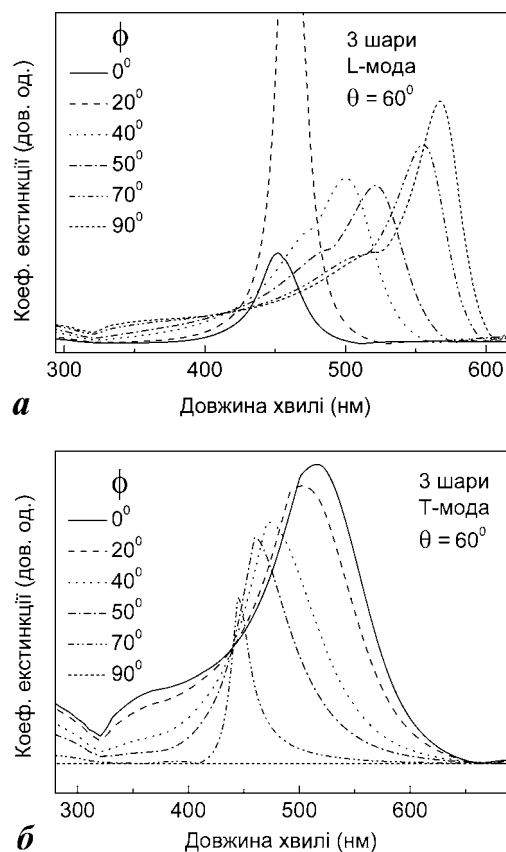


Рис. 2. Поведінка спектрів екстинкції системи 3-х паралельних моношарів наночастинок срібла, зумовлених збудженням у ній колективних L (а) та Т (б) поверхневих плазмонних мод при зміні азимутального кута поляризації ϕ . Кут падіння $\theta = 60^\circ$.

Система, що досліджується

Розглянемо процес екстинкції (послаблення) лінійно поляризованої світлової хвилі системою паралельних двовимірних (2D) масивів сферичних наночастинок металу (срібла) розміром (діаметром) 100 нм, хаотично розподілених у межах шару при середній відстані між наночастинок 150 нм. Відстань між сусідніми шарами – 250 нм. Вважатимемо, що сусідні шари розділені діелектричною плівкою з показником заломлення 1,8, що відповідає полімеру PGMA (полігліцидил метакрилат). Кутом падіння θ називатимемо кут між напрямком поширення падаючого світлового пучка та перпендикуляром до площини шару

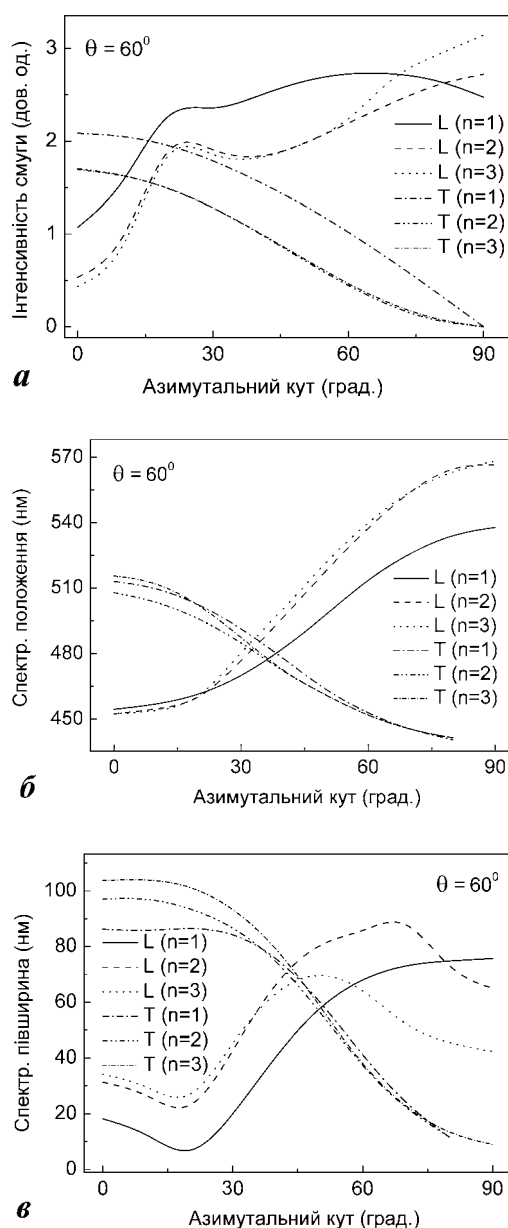


Рис. 3. Залежності інтегральної інтенсивності (а), спектрального положення (б) та півширини (в) смуг спектру екстинкції систем з різною кількістю моношарів ($n=1,2,3$) частинок срібла, зумовлених збудженням в ній колективних L та T поверхневих плазмонних мод, від азимутального кута поляризації ϕ . Кут падіння $\theta = 60^\circ$.

наночастинок. Азимутальний кут поляризації ϕ – кут між вектором напруженості електричного поля падаючої світлової хвилі $\mathbf{E}$ та площиною падіння, утвореною падаючим пучком та перпендикуляром до площини шару.

Модель зв'язаних диполів для розрахунку оптичних спектрів масивів сильно взаємодіючих наночастинок металів

Як відомо, взаємодія між металевими наночастинами в їх щільних масивах приводить до колективізації поверхневих плазмонних мод таких масивів [1,3,4]. Такі колективні моди поділяються на поздовжні або L-моди, для яких дипольний момент лежить у площині шару наночастинок металу, та поперечні або T-моди, для яких дипольний момент перпендикулярний до площини шару. Очевидно, що 2D-шар наночастинок матиме дві L-моди, вироджені за частотою, та одну T-моду.

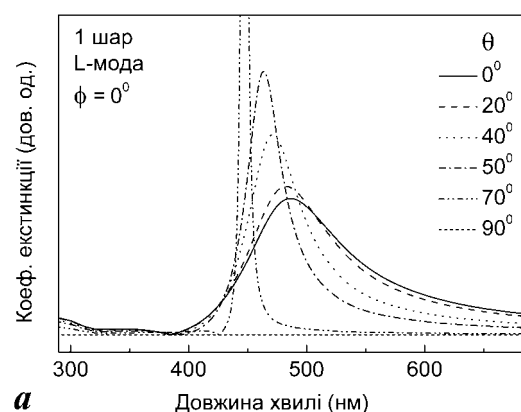
Для теоретичного аналізу оптичних властивостей описаних вище систем скористаємося моделлю зв'язаних диполів (coupled dipole approximation, CDA) [3]. Поведінка світла, що падає на частинку, описується рівняннями Максвелла для електричного і магнітного векторних полів. Загальна основа для моделювання оптичного відгуку масиву сфер включає самоузгоджений розв'язок відгуку від кожної частинки на поле, що падає, і на поле, розсіяне іншими частинками. У моделі зв'язаних диполів вважається, що всі частинки когерентно збуджені. Тоді вектор дипольної поляризації масиву наночастинок $\mathbf{P}_i$ у точці з радіус-вектором $\mathbf{r}_i$, що задає положення центру i -ї частинки визначається як

$$\mathbf{P}_i = \alpha \mathbf{E}_{loc,i}, \quad (1)$$

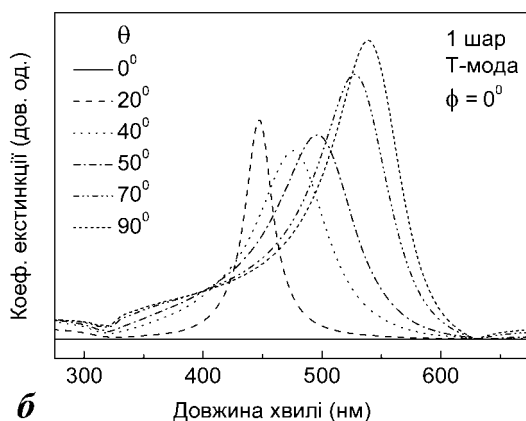
де α – дипольна поляризованість масиву взаємодіючих частинок, а $\mathbf{E}_{loc,i}$ – напруженість електричного поля у точці $\mathbf{r}_i$, що є сумою напруженості поля падаючої хвилі $\mathbf{E}_{inc,i} = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i}$ та напруженостей полів інших $N-1$ частинок (диполів) масиву, які визначаються як

$$\mathbf{E}_{loc,i} = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} + \sum_{j \neq i} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{ij}}}{r_{ij}^3} \left\{ k^2 [\mathbf{r}_{ij} \times [\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{P}_j]] + \frac{1 - i\mathbf{k}\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^2} [\mathbf{r}_{ij}^2 \mathbf{P}_j - 3\mathbf{r}_{ij}(\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{P}_j)] \right\}, \quad (2)$$

де $\mathbf{k}$ – хвильовий вектор світлової хвилі, $\mathbf{r}_{ij}$ – вектор, що з'єднує центри i -ї та j -ї частинок. Зазначимо, що вираз (2) є загальним для масиву частинок довільної розмірності і топології. Для 2D-моношару наночастинок з виразу (2) отримаємо



а



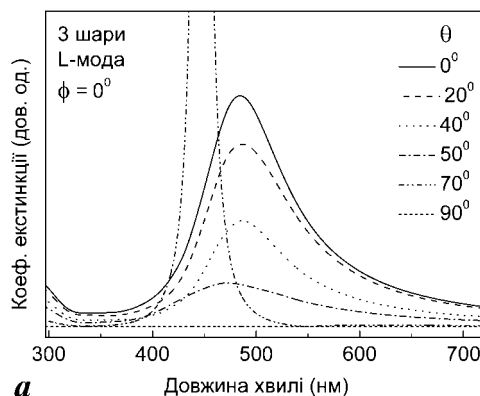
б

Рис. 4. Поведінка спектрів екстинкції моношару наночастинок срібла, зумовлених збудженням в ньому колективних L (а) та Т (б) поверхневих плазмонних мод при зміні кута падіння θ . Азимутальний кут поляризації $\phi = 0^\circ$ (Р-поляризація).

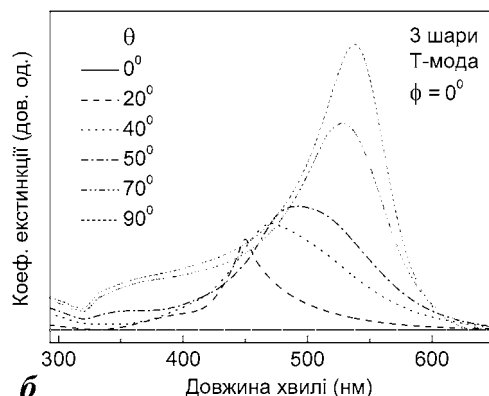
$$\mathbf{E}_{loc,i} = \mathbf{E}_0 e^{ikr_i} + \sum_{j \neq i} \left[\frac{(1 - ikr_{ij})(\sin^2 \phi - 3 \cos^2 \phi \cos^2 \theta)}{r_{ij}^3} - \frac{k^2 \sin^2 \phi}{r_{ij}} \right] e^{ikr_{ij}} \alpha_0 \mathbf{E}_{loc,j}^{(L)} + \sum_{j \neq i} \left[\frac{(1 - ikr_{ij}) \cos^2 \phi \sin^2 \theta}{r_{ij}^3} - \frac{k^2 \cos^2 \phi \sin^2 \theta}{r_{ij}} \right] e^{ikr_{ij}} \alpha_0 \mathbf{E}_{loc,j}^{(T)}, \quad (3)$$

де 2-й член описує поле, створене плазмовими коливаннями L-моди, а 3-й – плазмовими коливаннями Т-моди. У виразі (3): $\alpha_0 = a^3 \frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m}$ – дипольна поляризованість ізольованої сферичної частинки (a – радіус частинки).

Враховуючи, що в системі, що розглядається нами, відстань між частинками D є досить ма-



а



б

Рис. 5. Поведінка спектрів екстинкції системи 3-х паралельних моношарів наночастинок срібла, зумовлених збудженням в ній колективних L (а) та Т (б) поверхневих плазмонних мод при зміні кута падіння θ . Азимутальний кут поляризації $\phi = 0^\circ$ (Р-поляризація).

лою: $D = 1,5d$, де d – діаметр частинки, очевидним є те, що взаємодія між частинками буде близькопольовою (фьорстерівською), для якої $E \sim 1/r^3$, тобто досить швидко спадаючою з віддаленням від частинки. Тому логічним буде врахувати взаємодію тільки між найближчими сусідами. Дійсно, як було показано в [3], врахування взаємодії між дальшими сусідами слабо впливає на енергетичний спектр одновимірних ланцюжків наночастинок, отже наше наближення є цілком обґрунтованим. Таким чином, у наближенні взаємодії тільки між найближчими сусідами, розв'язуючи систему самоузгоджених рівнянь (1) та (3), можна отримати для дипольної поляризованості моношару сферичних наночастинок

$$\alpha_1 = \alpha_1^{(L)} + \alpha_1^{(T)} \quad (4)$$

де

$$\alpha_1^{(L)} = \frac{\alpha_0 (\sin^2 \phi + \cos^2 \phi \cos^2 \theta)}{1 - \alpha_0 S_1^{(L)}} \quad \text{і}$$

$$\alpha_1^{(T)} = \frac{\alpha_0 \cos^2 \phi \sin^2 \theta}{1 - \alpha_0 S_1^{(T)}}. \quad (5)$$

У свою чергу величини $S_1^{(L)}$ і $S_1^{(T)}$ визначаються як

$$S_1^{(L)} = \left[\frac{(1 - ikd)(\sin^2 \phi - 3 \cos^2 \phi \cos^2 \theta)}{d^3} - \frac{k^2 \sin^2 \phi}{d} \right] e^{ikd},$$

$$S_1^{(T)} = \left(\frac{1 - ikd}{d^3} - \frac{k^2}{d} \right) \cos^2 \phi \sin^2 \theta e^{ikd}. \quad (6)$$

Знаючи дипольну поляризованість моношару частинок α_1 , за наступною формулою можна розрахувати коефіцієнт екстинкції моношару, зумовлений збудженням окремо L або T-моди як суму перерізів поглинання та розсіяння світла

$$\sigma_{ext,1}^{(L)} = \sigma_{abs,1}^{(L)} + \sigma_{sca,1}^{(L)} = 4\pi k_m \text{Im} \alpha_1^{(L)} + \frac{8\pi}{3} k_m^4 |\alpha_1^{(L)}|^2,$$

$$\sigma_{ext,1}^{(T)} = \sigma_{abs,1}^{(T)} + \sigma_{sca,1}^{(T)} = 4\pi k_m \text{Im} \alpha_1^{(T)} + \frac{8\pi}{3} k_m^4 |\alpha_1^{(T)}|^2 \quad (7)$$

або інтегрального коефіцієнта екстинкції усього моношару

$$\sigma_{ext,1} = \sigma_{ext,1}^{(L)} + \sigma_{ext,1}^{(T)}, \quad (8)$$

де $k_m = \omega n_m / c$, а n_m – показник заломлення матриці, в якій знаходяться наночастинки.

Спектр екстинкції наноструктури, що складається з n моношарів наночастинок, можна знайти, узагальнивши модель зв'язаних диполів наступним чином. Коефіцієнт екстинкції n -шарової системи $\sigma_{ext,n}$ визначатиметься її дипольними поляризованостями $\alpha_n^{(L)}$ і $\alpha_n^{(T)}$ аналогічно наведеному для моношару у співвідношеннях (7), (8):

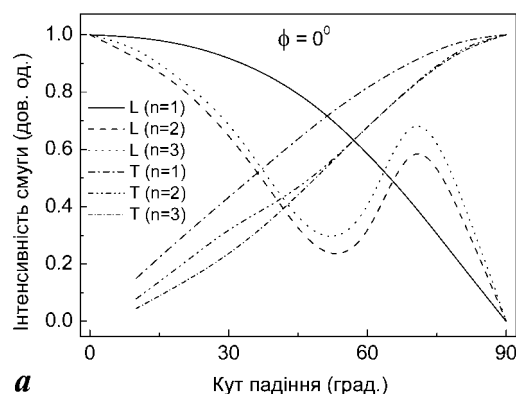
$$\sigma_{ext,n} = \sigma_{ext,n}^{(L)} + \sigma_{ext,n}^{(T)},$$

$$\sigma_{ext,n}^{(L)} = 4\pi k_m \text{Im} \alpha_n^{(L)} + \frac{8\pi}{3} k_m^4 |\alpha_n^{(L)}|^2,$$

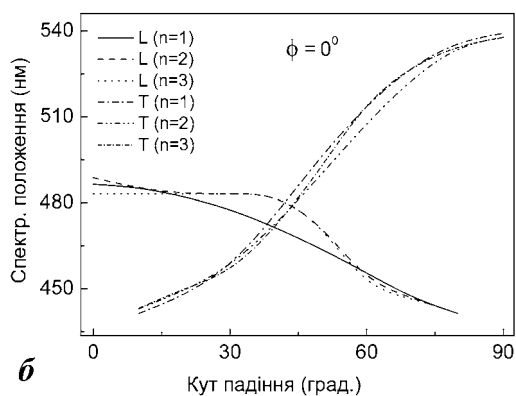
$$\sigma_{ext,n}^{(T)} = 4\pi k_m \text{Im} \alpha_n^{(T)} + \frac{8\pi}{3} k_m^4 |\alpha_n^{(T)}|^2, \quad (9)$$

$$\alpha_n^{(L)} = \frac{\alpha_1^{(L)} (\sin^2 \phi + \cos^2 \phi \cos^2 \theta)}{1 - \alpha_1^{(L)} S_n^{(L)}} \quad \text{і}$$

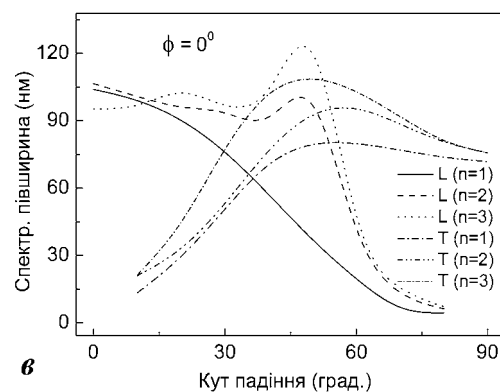
$$\alpha_n^{(T)} = \frac{\alpha_1^{(T)} \cos^2 \phi \sin^2 \theta}{1 - \alpha_1^{(T)} S_n^{(T)}}, \quad (10) \quad \text{де}$$



а



б



в

Рис. 6. Залежності інтегральної інтенсивності (а), спектрального положення (б) та півширини (в) смуг спектру екстинкції систем з різною кількістю моношарів ($n=1,2,3$) частинок срібла, зумовлених збудженням в ній колективних L та T поверхневих плазмонних мод, від кута падіння θ . Азимутальний кут поляризації $\phi = 0^\circ$ (Р-поляризація).

$$S_n^{(L)} = S_1^{(L)} + \Delta S_{12}^{(L)} + \dots + \Delta S_{1n}^{(L)},$$

$$S_n^{(T)} = S_1^{(T)} + \Delta S_{12}^{(T)} + \dots + \Delta S_{1n}^{(T)}, \quad (11)$$

$$\Delta S_{1j}^{(L)} = \frac{3 \sin^2 \theta [ik(j-1)D-1]}{[(j-1)D]^3} e^{ikd},$$

$$\Delta S_{1j}^{(T)} = \left[\frac{1-ik(j-1)D}{[(j-1)D]^3} - \frac{k^2}{(j-1)D} \right] \cos^2 \theta e^{ik(j-1)D}, \quad (12)$$

D – відстань між сусідніми шарами.

Кутова та поляризаційна залежності спектрів екстинкції систем n паралельних шарів наночастинок Ag: результати розрахунків та обговорення

Використовуючи розглянуту вище модель зв'язаних диполів, нами було виконано розрахунки спектрів екстинкції системи паралельних моношарів наночастинок Ag. Спочатку розрахунки було виконано для випадку не взаємодіючих частинок. Було отримано, що спектр є однокомпонентним. При цьому і спектральне положення, і півширина відповідної смуги не залежить ні від кута падіння θ , ні від азимутального кута поляризації ϕ .

Далі розрахунки було виконано для одного моношару взаємодіючих частинок (відстань в шарі – 150 нм). Поведінку спектрів моношару, зумовлених збудженням окремо L і T плазмонних мод, зображено на рис. 1 (в залежності від ϕ) та рис. 4 (в залежності від θ). На рис. 3 подано залежність положення, півшини та інтенсивності смуг кожної з мод від ϕ , а на рис. 6 – від θ . Видно, що при зміні ϕ , і θ має приводити до сильної зміни усіх характеристик смуг екстинкції, причому деякі залежності є суттєво немонотонними. Зауважимо, що залежності положення та півшини L і T-мод є принципово відмінними. Дійсно, для L-моди збільшення ϕ приводить до червоного зсуву відповідної смуги, а для T-моди – до блакитного. Залежність положення смуг від θ є протилежними: збільшення θ приводить до блакитного зсуву L-моди та червоного зсуву T-моди. Залежності півшини смуг різних мод також є принципово різними. Дійсно, при збільшенні ϕ має місце суттєво немонотонна залежність півшини смуги L-моди та монотонне звуження смуги T-моди. Залежності від θ є протилежними: збільшення θ приводить до монотонного звуження смуги L-моди та суттєво немонотонної залежності смуги T-моди. Звідси можна зробити висновок, що сильні

залежності спектральних характеристик смуг L і T-мод, які при цьому є принципово різними для різних мод, свідчать про виникнення колективних поверхневих плазмонних L і T-мод, які характеризуються різною орієнтацією дипольних моментів масиву наночастинок Ag.

Також нами було виконано розрахунки для складніших систем, що містять кілька (2 та 3) паралельних шарів наночастинок срібла. Поведінку спектрів екстинкції, зумовлених збудженням окремо L і T-мод в системі з трьох паралельних моношарів частинок Ag, при зміні кутів ϕ та θ подано на рис. 2 та 5 відповідно. Рис. 3 та 6 ілюструють залежності інтенсивності, положення та півшини відповідних смуг екстинкції від кутів ϕ і θ відповідно для систем з 2 та 3 моношарів частинок. Видно, що додавання нових шарів в систему якісно не змінює поляризаційні залежності характеристик смуг обох мод. Для T-моди подібними є залежності також від кута падіння θ . У той же час, L-мода сильно “відчуває” додавання нових шарів частинок. Дійсно, як видно з рис. 6, залежності усіх трьох характеристик її смуги стають немонотонними. Особливо цей ефект є сильним для залежності від θ інтенсивності смуги та її півшини. Така суттєва зміна характеру залежностей характеристик L-моди від θ імовірно свідчить про колективізацію L-мод різних шарів, тобто про виникнення колективних плазмонних мод усієї системи моношарів наночастинок Ag.

Список використаних джерел

1. Klimov V. V. Nanoplasmonics // Moscow. – Fizmatlit. – 2009. – 480 p. (in Russian).
2. Kreibig U. Optical properties of metal clusters / U. Kreibig, M. Vollmer // Berlin, Heidelberg. – Springer. – 1995. – 527 p.
3. Zhao L. The Extinction spectra of silver nanoparticle arrays: influence of array structure on plasmon resonance wavelength and width / L. Zhao, K. L. Kelly, G. C. Schatz // Journal of Physical Chemistry B. – 2003. – Vol. 107. – P. 7343–7350.
4. Pinchuk A. O. Angle dependent collective surface plasmon resonance in an array of silver nanoparticles // Journal of Physical Chemistry A. – 2009. – Vol. 113. – P. 4430–4436.

Надійшла до редколегії 2.07.2013

УДК 535.211; 535.233

Зеленський С.Є.¹, д.ф.м.н., проф.,
Копишинський О.В.², к.ф.м.н., доц.

Індуковане лазером теплове випромінювання поверхневих шарів з температурно-залежним коефіцієнтом поглинання

Проведено комп'ютерне моделювання впливу індукованих температурою змін коефіцієнта поглинання поверхні, що опромінюється лазерним випромінюванням, на нелінійні властивості індукованого лазером теплового випромінювання. Розрахунки проведено з використанням рівняння теплопровідності з функцією джерела тепла, зумовленого лазерним імпульсом дзвоноподібної форми тривалістю 20 нс. Інтенсивність теплового випромінювання розраховувалась з використанням функції Планка для випромінювання абсолютно чорного тіла шляхом інтегрування по опромінюваній поверхні і за часом. У розрахунках розглянуто випадки лінійного та нелінійного зростання коефіцієнта поглинання з температурою. Результати розрахунків свідчать, що зростання коефіцієнта поглинання з температурою суттєво впливає на поведінку теплового випромінювання при змінах лазерної потужності, причому цей ефект найбільш сильно проявляється у випадку нелінійної температурної залежності коефіцієнта поглинання. Можливості експериментального спостереження передбачуваного ефекту обговорюються.

Ключові слова: теплове випромінювання, імпульсне лазерне збудження.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4, e-mail: zele@univ.kiev.ua

² Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4, e-mail: kopyshinsky@univ.kiev.ua

S.E.Zelensky¹, Dr.Sci., Prof.,
O.V.Kopyshinsky², PhD, Assoc.Prof.

Laser-induced incandescence of surface layers with temperature-sensitive absorption coefficient

The effect of temperature-induced changes of absorption coefficient of laser-irradiated surface on the non-linear properties of laser-induced incandescence is investigated by computer simulations. Calculations were performed with the use of heat transfer equation with pulsed-laser heat source function for a bell-shaped laser pulse with duration of 20 ns. The intensity of LII was calculated with the use of Planck's blackbody function by integrating over the irradiated surface and over time. In the calculations, the dependence of absorption coefficient on temperature was considered as linear and non-linear growth. The results of calculations show that the increase of absorption with temperature causes significant effect on the behavior of LII with changing the laser power. The effect is most pronounced for non-linear functions of absorption coefficients. The possibilities of experimental observation of the predicted effect are discussed.

Key Words: laser-induced incandescence, pulsed excitation.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4, e-mail: zele@univ.kiev.ua

² Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4, e-mail: kopyshinsky@univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Відомо, що при потужному імпульсному лазерному збудженні матеріалів з достатньо великим коефіцієнтом поглинання спостерігається світіння, зумовлене короткотривалим нагріванням поверхневих шарів до температур порядку декількох тисяч градусів.

Для такого типу світіння зазвичай використовують англomовну назву «laser-induced incandescence» (скорочено – LII), що можна перекласти як «індуковане лазером теплове випромінювання». Нижче в даній роботі у

позначеннях ми будемо використовувати загальноприйняту аббревіатуру ЛП.

Дослідженню індукованого лазером теплового випромінювання присвячена значна кількість робіт, лівова частка яких присвячена дослідженню світіння мікрочастинок вуглецю, підвішених у різних матрицях, при збудженні наносекундними лазерними імпульсами (див., наприклад, [1 – 20]). Є також повідомлення про спостереження індукованого лазером теплового випромінювання мікрочастинок кремнію [21], вуглецевих нанотрубок [22] та поверхневих шарів вуглецю [23,24]. Інтерес до вивчення індукованого лазером теплового випромінювання значною мірою зумовлений перспективами практичного застосування цього типу світіння для моніторингу процесів горіння органічного палива, контролю за температурою, тощо.

У багатьох випадках для моделювання індукованого лазером теплового випромінювання використовують характеристики середовища, зокрема, коефіцієнт поглинання, які не змінюються в процесі лазерного розігріву і послідовного охолодження. Наприклад, для розрахунків теплового випромінювання вуглецевих мікрочастинок використовують оптичні сталі вуглецю, які дозволяють визначити переріз поглинання світла мікрочастинкою за теорією Мі.

В даній роботі методом комп'ютерного моделювання аналізуються закономірності індукованого лазером теплового випромінювання світлопоглинальних поверхонь у випадках, коли коефіцієнт поглинання матеріалу поверхні залежить від температури, а саме, збільшується при нагріванні. Іншими словами, аналізуються закономірності теплового випромінювання поверхонь з нелінійно-оптичними властивостями, зумовленими тепловим механізмом виникнення уявної частини нелінійної сприйнятливості третього і більш високих непарних порядків по напруженості поля світлової хвилі.

Розглянемо пучок лазерного випромінювання, який падає перпендикулярно на поверхню досліджуваного зразка матеріалу. Спрямуємо координатну вісь z у напрямку поширення лазерного світла. Вісь лазерного пучка відповідає умові $x = y = 0$, а поверхня зразка, на яку падає випромінювання, відповідає $z = 0$.

Нехай інтенсивність (поверхнева густина потужності) лазерного випромінювання на вході у досліджуваний зразок описується таким виразом

$$F = F_0 \exp \left[- \left(\frac{t}{\tau} \right)^2 4 \ln 2 - \frac{R^2}{R_L^2} \right], \quad (1)$$

де $R = \sqrt{x^2 + y^2}$ – відстань від осі пучка; F_0 – максимальне значення (амплітуда) інтенсивності; $\tau = 20$ нс – тривалість лазерного імпульсу; $R_L = 10$ мкм – радіус лазерного пучка.

Припустимо, що всередині досліджуваного середовища інтенсивність лазерного випромінювання підкоряється рівнянню

$$dF = -\alpha F dz, \quad (2)$$

де $\alpha = \alpha(T)$ – коефіцієнт поглинання на довжині хвилі лазерного випромінювання, який є функцією температури T . Оскільки температура в досліджуваному середовищі при імпульсному лазерному опроміненні буде різною в різних точках середовища в різні моменти часу, то і коефіцієнт поглинання буде функцією координат і часу.

Для опису динаміки зміни температури у різних точках досліджуваного середовища у даній роботі у розрахунках було використано рівняння теплопровідності

$$\text{div}(\kappa \text{ grad} T) + \alpha F = c_p \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (3)$$

де температура всередині середовища є функцією координат і часу, $T = T(\vec{r}, t)$; $\kappa = 6$ Вт м⁻¹ К⁻¹ – коефіцієнт теплопровідності, вважається сталим; $c_p = 1.6 \cdot 10^6$ Дж м⁻³ К⁻¹ – питома теплоємність, вважається сталою. Обрані значення коефіцієнту теплопровідності і теплоємності близькі до відповідних значень для вуглецю.

У розрахунках досліджуване середовище представляє собою плоскопаралельну пластину товщиною $d = 2$ мкм. Пластина теплоізольована від оточуючого середовища. Коефіцієнт відбиття лазерного випромінювання від поверхні покладений рівним нулю. Початкова температура середовища перед лазерним опроміненням покладена $T_a = 293$ К.

Для розрахунку сигналів індукованого лазером теплового випромінювання використано формулу Планка для випромінювання абсолютно чорного тіла

$$i_{\text{ЛП}} = \frac{C_1 / \lambda^5}{\exp \left(\frac{C_2}{\lambda T} \right) - 1} \quad (4)$$

де C_1, C_2 – сталі, $\lambda = 500$ нм – довжина хвилі, на якій здійснюється реєстрація теплового випромінювання. Вважається, що випромінювальна здатність на обраній довжині хвилі від температури не залежить.

Варто додатково підкреслити, що в даній роботі розглядається випадок, коли теплове випромінювання реєструється на фіксованій довжині хвилі (наприклад, фотопомножувачем через монохроматор). Саме така постановка експериментів найбільш часто вживана. Крім того, у розглядуваному випадку теплове випромінювання представляє собою короткий імпульс тривалістю порядку декількох десятків наносекунд. В найпростішому випадку ці імпульси реєструють фотоприймачами з інтегруванням по часу. Тому у даній роботі сигнали індукваного лазером теплового випромінювання розраховувались шляхом інтегрування виразу (4) за часом t і по поверхні зразка S , на яку було спрямоване лазерне випромінювання, а саме

$$I_{\text{ЛП}}^{(t)} = \int i_{\text{ЛП}}(\vec{r}, t) d\vec{r}, \quad (5)$$

$$I_{\text{ЛП}}^{(S)} = \int i_{\text{ЛП}}(\vec{r}, t) dS, \quad (6)$$

$$I_{\text{ЛП}}^{(S, t)} = \int i_{\text{ЛП}}(\vec{r}, t) dS dt. \quad (7)$$

При цьому інтегрування за часом було обмежене інтервалом від -2τ до 10τ , в межах якого сигнал $i_{\text{ЛП}}$ встигав виникнути і практично повністю згаснути. Інтегрування по поверхні зразка було обмежене відстанню $R_0 = 2R_L = 20$ мкм від осі лазерного пучка.

Розміри області інтегрування по координаті R значно перевищують довжину теплової дифузії за час інтегрування 10τ : $\sqrt{\frac{\kappa}{C_p}} 10\tau \approx 10^{-6}$ м. Крім

того, оцінки показали, що сигналом теплового випромінювання з області $R > R_0$ можна нехтувати.

В даній роботі комп'ютерне моделювання було реалізоване як чисельне розв'язання системи рівнянь (2) та (3) з розрахунком сигналу індукваного лазером теплового випромінювання згідно з виразами (4) та (7). Як початкові і граничні умови було використано вираз (1), співвідношення $T(t = -2\tau) = T_a$, та умову теплоізоляції досліджуваного зразка від оточуючого середовища.

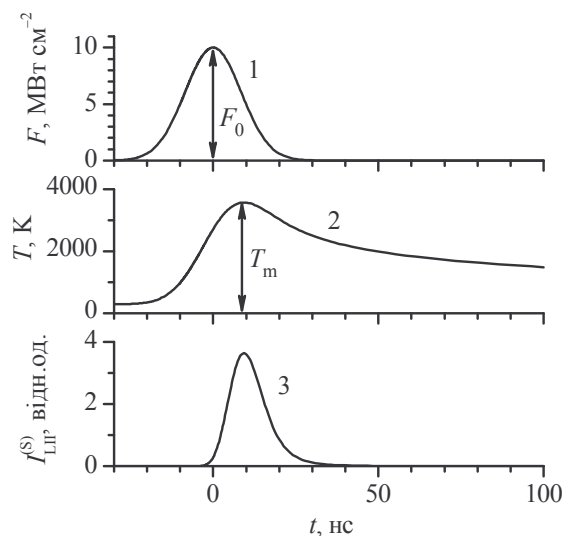


Рис. 1. Типові осцилограми лазерного імпульсу (1), температури поверхні на осі лазерного пучка (2) і інтенсивності $I_{\text{ЛП}}^{(S)}$ для випадку $\alpha = \text{const} = 10^7 \text{ м}^{-1}$.

Розглянемо спочатку результати моделювання у випадку $\alpha = \text{const}$. Розрахунки проведено для двох значень $\alpha = 10^6$ та 10^7 м^{-1} . Останнє з двох обраних значень наближено відповідає поглинанню світла поверхнею вуглецю на довжині хвилі неодимового лазера.

Типові осцилограми інтенсивності світіння поверхні зразка $I_{\text{ЛП}}^{(S)}$ і температури поверхні на осі пучка наведені на рис.1 (криві 3 та 2 відповідно) для $F_0 = 10 \text{ МВт см}^{-2}$, $\alpha = 10^7 \text{ м}^{-1}$. На

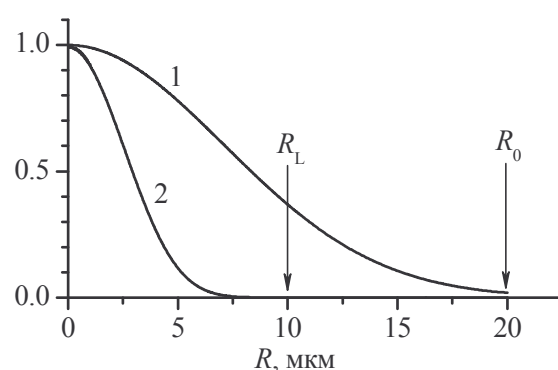


Рис. 2. Залежності максимальної температури ($T_m - T_a$) на поверхні (1) і інтенсивності світіння $I_{\text{ЛП}}^{(t)}$ (2) від відстані R від осі лазерного пучка. Обидві криві нормовані по максимуму.

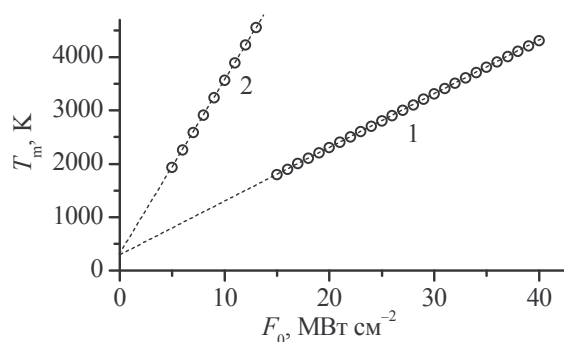


Рис. 3. Залежність температури поверхні T_m на осі лазерного пучка від інтенсивності F_0 для випадків $\alpha = \text{const} = 10^6$ (1) та 10^7 м^{-1} (2).

кривій 2 уведено позначення T_m для максимального значення температури в процесі опромінення лазерним імпульсом. Крива 1 на рис.1 ілюструє форму лазерного імпульсу згідно з виразом (1). З рис.1 видно, що максимум імпульсу світіння (крива 3) не збігається з максимумом лазерного імпульсу (крива 1). В даному випадку зсув між імпульсами $I_{\text{ЛІ}}^{(S)}$ та F становить близько 9 нс. Зазначимо, що у подальших розрахунках з температурно-залежним коефіцієнтом поглинання зсув між лазерним імпульсом і імпульсом світіння залежить від параметрів розрахунку і іноді досягає 17 нс.

Для поверхні зразка, яку опромінює лазерний пучок, на рис.2 наведено нормовані залежності максимальної температури $(T_m - T_a)$ (крива 1) і інтенсивності світіння $I_{\text{ЛІ}}^{(I)}$ (згідно з виразом (5), крива 2 на рис.2) від відстані R від осі лазерного пучка. Відзначимо, що крива 1 практично збігається з нормованою залежністю інтенсивності лазерного випромінювання $F(R) = \exp[-R^2/R_L^2]$. Ця обставина є свідченням того, температура на поверхні зразка $(T_m - T_a)$ є лінійною функцією від інтенсивності лазерного випромінювання F .

Підтвердженням останнього висновку є наведені на рис.3 розраховані залежності максимальної температури поверхні T_m на осі пучка від амплітуди лазерної інтенсивності F_0 для двох значень коефіцієнта поглинання на довжині хвилі лазерного випромінювання $\alpha = 10^6$ та 10^7 м^{-1} . Важливо, що обидва графіки на рис.3 добре апроксимуються лінійними функціями, які

перетинають вертикальну вісь в одній і тій точці $T_a = 293 \text{ К}$.

Таким чином, якщо $\alpha = \text{const}$, можна користуватись наближеним виразом

$$T_m - T_a = \text{const} \cdot F_0 \quad (8)$$

або

$$dT_m = \text{const} \cdot dF_0.$$

В роботі [11] запропоновано оригінальний метод оцінки температури T_m розігрітих лазерним випромінюванням мікрочастинок в суспензії. Метод ґрунтується на аналізі залежності інтенсивності індукованого лазером теплового випромінювання від інтенсивності лазерного збудження. Отриманий вище вираз (8) фактично обґрунтовує можливість застосування згаданого методу вимірювання температури для випадку лазерного збудження світлопоглинальних поверхонь.

Становить інтерес залежність інтегральної інтенсивності $I_{\text{ЛІ}}^{(S,I)}$ (згідно з виразом (7)) від інтенсивності лазерного збудження F_0 . Саме цю залежність зазвичай безпосередньо отримують в експериментах. Результати розрахунків $I_{\text{ЛІ}}^{(S,I)}(F_0)$ наведено на рис.4-а у подвійному логарифмічному масштабі. З рисунку видно, що залежності $I_{\text{ЛІ}}^{(S,I)}(F_0)$ властива значна нелінійність (нахил графіку у подвійному логарифмічному масштабі суттєво перевищує одиницю).

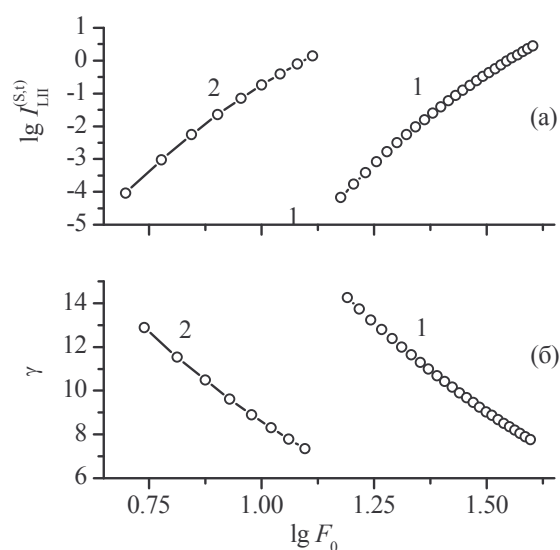


Рис.4. Залежність сигналу ЛІІ (а) та показника γ (б) від інтенсивності лазерного випромінювання для випадків $\alpha = \text{const} = 10^6$ (1) та 10^7 м^{-1} (2).

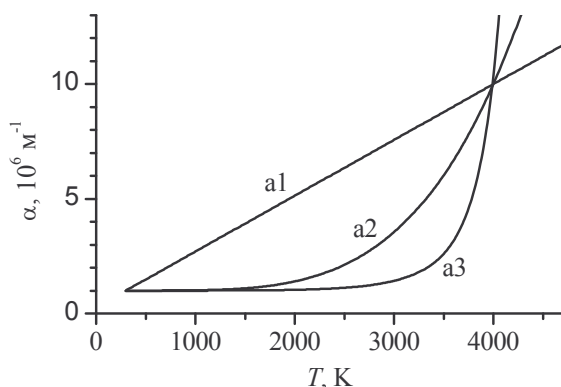


Рис. 5. Три варіанти залежності коефіцієнта поглинання від температури.

Для подальшого аналізу зручно скористатись підходом, запровадженим в роботі [11]. Введемо безрозмірний параметр

$$\gamma = \frac{dI_{\text{ЛП}}^{(S,t)} / I_{\text{ЛП}}^{(S,t)}}{dF_0 / F_0}, \quad (9)$$

який характеризує нахил залежності $\lg I_{\text{ЛП}}^{(S,t)}$ від $\lg F_0$. Уведений таким чином параметр γ легко отримати з результатів експериментів, причому його величина не залежить від того, в яких одиницях представлені результати вимірювань. На рис.4-6 наведено розраховані залежності $\gamma(F_0)$ для двох випадків $\alpha = \text{const}$.

Варто зазначити, що наведені вище розрахункові дані, отримані за умови $\alpha = \text{const}$, добре узгоджуються з результатами експериментів, проведених з поверхнями вуглецю при збудженні випромінюванням неодимового лазера з модуляцією добротності [23,24]. Проте, ретельне порівняння зазначених результатів розрахунків з відповідними результатами експериментів не є метою даної роботи. Зазначимо лише, що залежності, наведені на рис.4, мають вигляд, типовий для відповідних експериментальних кривих для індукованого лазером теплового випромінювання як світлопоглинальних мікрочастинок, так і поверхонь. Натомість, перейдемо до розгляду результатів розрахунків, в яких враховано залежність коефіцієнта поглинання від температури.

Щоб з'ясувати вплив, який чинить температурна залежність коефіцієнта поглинання $\alpha(T)$ на характеристики теплового випромінювання світлопоглинальних поверхонь

при лазерному збудженні, в даній роботі здійснено моделювання взаємодії імпульсного лазерного випромінювання з гіпотетичними середовищами, у яких коефіцієнт поглинання змінюється з температурою, як зображено на рис.5. Відповідні результати розрахунків наведено на рис.6, 7.

На рис.6 наведено залежність температури T_m в точці на поверхні на осі пучка ($R = 0$; $z = 0$) від інтенсивності лазерного випромінювання F_0 . З рис.6 видно, що в усіх розглянутих випадках залежності $\alpha(T)$, зображених на рис.5, співвідношення (8) порушується, тобто залежність температури від інтенсивності стає нелінійною. Звідси випливає, що запропонований раніше метод вимірювання температури [11] непридатний для поверхонь матеріалів, у яких коефіцієнт поглинання залежить від температури.

На рис.7 наведено типові залежності інтенсивності світіння $I_{\text{ЛП}}^{(S,t)}$ та показника γ від інтенсивності F_0 для випадку залежності a3 (рис.5). З рис.7 видно, що залежність $I_{\text{ЛП}}^{(S,t)}(F_0)$ нелінійна, причому показник нелінійності γ змінюється з інтенсивністю F_0 . На відміну від рис.4-6, на рис.7 звертає на себе увагу незвична немонотонна залежність $\gamma(F_0)$: зростання γ зі збільшенням F_0 є проявом залежності коефіцієнта поглинання матеріалу від температури.

Для порівняння результатів розрахунків, проведених для випадків $\alpha = \text{const}$ та $\alpha = \alpha(T)$, представимо їх як залежність показника γ від температури T_m (див. рис.8). По-перше, важливо,

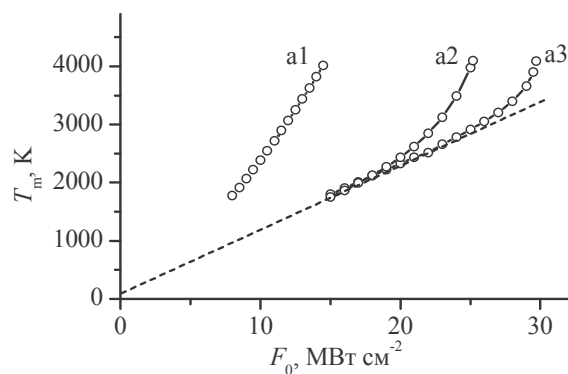


Рис.6. Залежність температури поверхні T_m на осі лазерного пучка від інтенсивності F_0 для випадків a1, a2, a3 (рис.5).

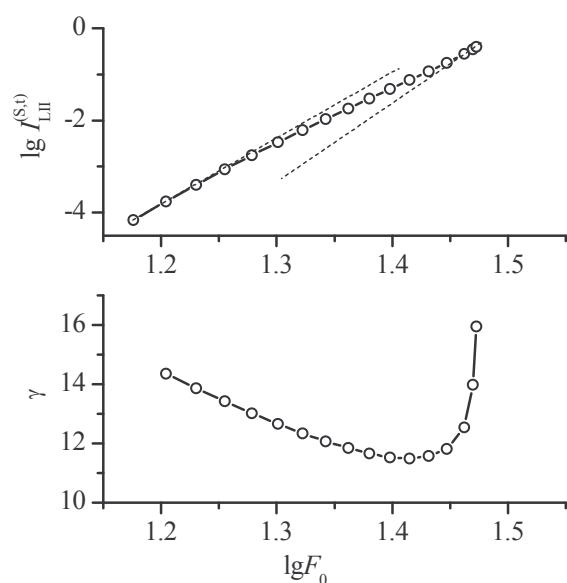


Рис.7. Залежність сигналу індукованого лазером теплового випромінювання та показника γ від інтенсивності лазерного випромінювання для випадку а3 (рис.5).

що на рис.8 криві 1 та 2, які відповідають сталим значенням коефіцієнта поглинання $\alpha=10^6$ та 10^7 м^{-1} практично збігаються. Це означає, що для поверхонь з $\alpha=\text{const}$ величина показника нелінійності γ однозначно зв'язана з температурою T_m , що дає можливість оцінювати температуру поверхні при лазерному опроміненні, аналогічно [11].

Що стосується поверхонь з температурно-залежним коефіцієнтом поглинання, для них згаданий метод вимірювання температури непридатний. Наприклад, збільшення коефіцієнта поглинання при температурі вище 3000 К (крива а3 на рис.5) призводить до збільшення показника γ (крива а3 на рис.8). Аналогічна поведінка спостерігається у випадку а2 (рис.5 та 8). У випадку лінійного зростання коефіцієнта поглинання з температурою (випадок а1 на рис.5) відповідні значення γ також підвищені (крива а1 порівняно з кривими 1,2 на рис.8).

Як можна побачити з рис.8, криві а1, а2 та а3, аномальна поведінка показника γ (збільшення γ зі зростанням F_0 , див. рис.7) притаманна випадкам, коли температурна залежність коефіцієнта поглинання надлінійна (випадки а2 та а3 на рис.5). Для лінійної

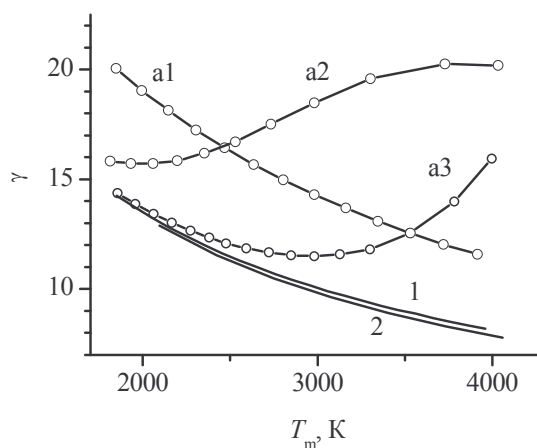


Рис.8. Залежність показника γ від максимальної температури поверхні T_m для випадків $\alpha=\text{const}=10^6$ (1) і 10^7 м^{-1} (2) та для випадків а1, а2, а3 (рис.5).

залежності $\alpha(T)$ збільшення γ зі зростанням F_0 не спостерігається (рис.8, крива а1).

Становить інтерес відшукати такий об'єкт, у якого спостерігалось б на експерименті збільшення γ зі зростанням F_0 . У досліджених раніше об'єктах або спостерігалось зменшення γ зі зростанням F_0 , або ця залежність не досліджувалась. Авторам відомий лише один випадок спостереження аномальної поведінки показника γ на експерименті. Цей випадок описаний в роботі [25], де повідомляється про спостереження теплового випромінювання при опроміненні поверхні кремнієвої пластини випромінюванням неодимового лазера. В експериментах використано лазер з модуляцією добротності з тривалістю імпульсу близько 20 нс і густиною потужності $100\ldots 200 \text{ МВт см}^{-2}$. Довжина хвилі випромінювання лазера 1.06 мкм відповідала краю зон-зонного поглинання кремнію. За таких умов експерименти продемонстрували аномальну поведінку показника γ .

Відомо [26 – 28], що коефіцієнт поглинання кремнію на довжині хвилі 1.06 мкм значно збільшується при нагріванні, що може бути причиною спостережуваної поведінки показника γ . Але коректно змоделювати спостережувану на експерименті залежність $\gamma(F_0)$, використовуючи дані про температурну залежність коефіцієнта поглинання, опубліковані

в роботах [26 – 28], не вдається. Причиною є наступна обставина.

Як з'ясовано в роботі [25], для спостереження помітного світіння у видимій ділянці спектру досліджуваний зразок кремнію мусить бути попередньо опромінений декількома десятками лазерних імпульсів з густиною потужності не менше 180 МВт см^{-2} . Внаслідок лазерного опромінення фізичні властивості поверхні суттєво змінюються, що відкриває можливості для спостереження індукованого лазером теплового випромінювання при таких значеннях густини потужності, при яких неопромінена поверхня не демонструє помітного світіння у видимій області спектру. Зокрема, після лазерного опромінення полірована поверхня перетворюється на шорстку. Крім того, імовірно після лазерного опромінення змінюється структура матеріалу поверхні. Зокрема, в роботі [25] висловлюється припущення, що після лазерного розігріву кристалічний кремній в приповерхневому шарі може частково трансформуватись в аморфну модифікацію. Це може призвести до суттєвого збільшення коефіцієнта поглинання на довжині хвилі лазерного випромінювання, що полегшує умови для лазерного розігрівання поверхні. Але характер зазначених вище лазерно-індукованих змін властивостей поверхні остаточно не з'ясований, що значно ускладнює опис

досліджуваного явища з використанням моделі, яка пропонується у даній роботі.

Наприкінці варто зробити ще одне зауваження. В принципі хід кривої $\gamma(F_0)$ в області позитивних значень похідної $d\gamma/dF_0 > 0$ містить інформацію про залежність $\alpha(T)$ досліджуваного матеріалу. Але, на жаль, в експериментах з наносекундними лазерними імпульсами точність вимірювання параметра γ в області значень порядку $7 \dots 10$ залишається невисокою, що обмежує можливості для виокремлення залежності $\alpha(T)$ з експериментальних даних $\gamma(F_0)$.

Таким чином, за результатами даної роботи можна зробити такі висновки. По-перше, для поверхонь зі сталим коефіцієнтом поглинання при імпульсному лазерному опроміненні можна оцінити температуру поверхні за даними вимірювань показника γ на фіксованій довжині хвилі індукованого лазером теплового випромінювання. По-друге, аномальну поведінку показника γ (зростання зі збільшенням F_0) можна розглядати як непряме свідчення того, що коефіцієнт поглинання досліджуваного матеріалу досить сильно збільшується при нагріванні.

Список використаних джерел

1. Schulz C, Kock B.F., Hofmann M., Michelsen H., Will S., Bougie B., Sultz R., Smallwood G. Laser-induced incandescence: Recent trends and current questions// *Appl. Phys. B.* – 2006. – V.83, N.3. – P.333–354.
2. Melton L.A. Soot diagnostics based on laser heating// *Appl. Opt.* – 1984. – V.23, N.13. – P.2201–2208.
3. Vander Wal R.L., Weiland K.J. Laser-induced incandescence: development and characterization towards a measurement of soot-volume fraction// *Appl. Phys. B.* – 1994. – V.59. – P.445–452.
4. Vander Wal R.L., Zhou Z., Choi M.Y. Laser-induced incandescence calibration via gravimetric sampling// *Combustion and Flame.* – 1996. – V.105. – P.462–470.
5. Shaddix C.R., Smyth K.C. Laser-induced incandescence measurements of soot production in steady and flickering methane, propane, and ethylene diffusion flames// *Combustion and Flame.* – 1996. – V.107. – P.418–452.
6. Hofmann M., Bessler W.G., Schulz C., Jander H. Laser-induced incandescence for soot diagnostics at high pressures// *Appl. Opt.* – 2003. – V.42, N.12. – P.2052–2062.
7. Michelsen H.A. Understanding and predicting the temporal response of laser-induced incandescence from carbonaceous particles// *J. Chem. Phys.* – 2003. – V.118, N.15. – P.7012–7045.
8. Thomson K.A., Geigle K.P., Kohler M., Smallwood G.J., Snelling D.R. Optical properties of pulsed laser heated soot// *Appl. Phys. B.* – 2011. – V.104. – P.307–319.
9. De Iuliis S., Cignoli F., Maffi S., Zizak G. Influence of the cumulative effects of multiple laser pulses on laser-induced incandescence signals from soot// *Appl. Phys. B.* – 2011. – V.104. – P.321–330.
10. Michelsen H.A., Liu F., Kock B.F., Bladh H., Boiarciuc A., et al. Modeling laser-induced incandescence of soot: a summary and

- comparison of LII models// *Appl. Phys. B.* – 2007. – V.87. – P.503–521.
11. Zelensky S. Laser-induced heat radiation of suspended particles: a method for temperature estimation// *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* – 1999. – V.1. – P.454–458.
 12. Vander Wal R.L. Laser-induced incandescence: excitation and detection conditions, material transformations and calibration// *Appl. Phys. B.* – 2009. – V.96. – P.601–611.
 13. Sommer R., Leipertz A. Application of laser-induced incandescence to suspended carbon black particles// *Optics Letters.* – 2007. – V.32, N.13. – P.1947–1949.
 14. Rulik Ju.Ju., Mikhailenko N.M., Zelensky S.E., Kolesnik A.S. Laser-induced incandescence in aqueous carbon black suspensions: the role of particle vaporization// *Semicond. Phys., Quant. Electron. & Opto-electron.* – 2007. – V.10, N.2. – P.6–10.
 15. Zelensky S. Laser-induced heat radiation in borate glass// *J. Phys.: Condens. Matter.* – 1998. – V.10. – P.7267–7272.
 16. Kopyshinsky A.V., Lazorenko Ya.P., Zelensky S.E. Laser-induced incandescence of borate glass doped with carbon microparticles// *Functional Materials.* – 2011. – V.18, N.1. – P.116–120.
 17. Zelensky S. E., Kopyshinsky O. V., Garashchenko V. V., Kolesnik A. S., Stadnytskyi V. M., Zelenska K. S., Shynkarenko Ye.V. Optical transmittance of carbon suspensions in polymer matrixes under powerful pulsed laser irradiation// *Semicond. Phys., Quant. Electron. & Opto-electron.* – 2010. – V.13, N.1. – P.70–73.
 18. Zelensky S.E., Kolesnik A.S., Kopyshinsky O.V., Garashchenko V.V., Zelenska K.S., Stadnytskyi V.M., Shynkarenko E.V. Thermal emission of carbon microparticles in polymer matrices under pulsed laser excitation// *Ukr. J. Phys.* – 2009. – V.54, N.10. – P.983–988.
 19. Liu F., Daun K.J., Beyer V., Smallwood G.J., Greenhalgh D.A. Some theoretical considerations in modeling laser-induced incandescence at low-pressures // *Appl. Phys. B.* – 2007. – V.87. – P.179–191.
 20. De Iuliis S., Migliorini F., Cignoli F., Zizak G. Peak soot temperature in laser-induced incandescence measurements // *Appl. Phys. B.* – 2006. – V.83. – P.397–402.
 21. Roura P., Costa J. Radiative thermal emission from silicon nanoparticles: a reversed story from quantum to classical theory // *European J. Phys.* – 2002. – V.23. – P.191–203.
 22. Zeng H., Yang C., Dai J., Cui X. Light-induced incandescence of single-walled carbon nanotubes // *J. Phys. Chem. C.* – 2008. – V.112. – P.4172–4175.
 23. Zelensky S.E., Poperenko L.V., Kopyshinsky A.V., Zelenska K.S. Nonlinear characteristics of laser-induced incandescence of rough carbon surfaces// *Proc. SPIE.* – 2012. – V.8434. – P.84341H1–6.
 24. Zelensky S.E., Zelenska K.S. Laser-induced incandescence of carbon surface: a method for temperature estimation // *Proc. SPIE.* – 2013. – V.8772. – P.8772P1–8.
 25. Kopyshinsky A.V., Zelensky S.E., Gomon E.A., Rozouvan S.G., Kolesnik A.S. Laser-induced incandescence of silicon surface under 1064 nm excitation// *Semicond. Phys., Quant. Electron. & Opto-electron.* – 2012. – V.15, N 4. – P.376–381.
 26. Rajkanan K., Singh R., Shewchun J. Absorption coefficient of silicon for solar cell calculations// *Solid-State Electronics.* – 1979. – V.22, N.9. – P.793–795.
 27. Sin E.H., Ong C.K., Tan H.S. Temperature dependence of interband optical absorption of silicon at 1152, 1064, 750, and 694 nm// *Phys. Stat. Sol. (a).* – 1984. – V.85. – P.199–204.
 28. Ong C.K., Tan H.S., Sin E.H. Calculations of melting threshold energies of crystalline and amorphous materials due to pulsed-laser irradiation// *Mater. Sci. Eng.* – 1986. – V.79. – P.79–85.

Надійшла до редколегії 03.06.13

УДК 535.215.4; 535.34; 535.37

Кондратенко С.В.¹, к.ф.-м.н., доц.,
Козирев Ю.М.², к.ф.м.н., с.н.с.,
Сторожук Д.П.¹, студент

Вплив наноострівців SiGe на процеси рекомбінації в гетероструктурах Si/Ge з наноострівцями SiGe

Для вивчення процесів рекомбінації досліджено спектральні та часові залежності позовжньої фотопровідності наногетероструктур Si/Ge з наноострівцями SiGe, отриманих методом молекулярно-променевої епітаксії. Фотопровідність при $T < 190$ K, в спектральній області, де Si є прозорим, зумовлена переходами за участю локалізованих станів наноострівців SiGe. Показано, що при зниженні температури найбільш суттєвим виявилось зменшення фотопровідності в області фундаментального поглинання наноострівців. Це свідчить про високу ефективність центрів рекомбінації електрон-діркових пар в SiGe наноострівцях.

Ключові слова: фотопровідність, рекомбінація, наноострівці.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет, пр-т. Глушкова 4, Київ, 03127, e-mail: kondr@univ.kiev.ua

² Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164 e-mail: mruby@ukr.net

S. V. Kondratenko¹, PhD,
Yu.N. Kozyrev², Sen. Sci. Res.,
D. P. Storozhuk¹, stud.

Effect of SiGe nanoislands on recombination processes in heterostructures Si/Ge with SiGe nanoislands

To research the recombination processes Spectral and time dependences of lateral photoconductivity nanoheterostructures Si/Ge with SiGe nanoislands, obtained by molecular beam epitaxy were studied. Photoconductivity at $T < 190$ K, in the spectral region where Si is transparent, is conditioned due to transitions involving localized states nanoislands SiGe. It is shown that when the temperature was decreased the most significant is the decrease in the photoconductivity of the fundamental absorption of nanoislands. This shows the high efficiency of recombination centers of electron-hole pairs in SiGe nanoislands.

Key Words: photoconductivity, recombination, nanoislands.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, faculty of physics 03127, Kyiv, Glushkova st. 4, e-mail: kondr@univ.kiev.ua

² Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine, 17 General Naumov Str., Kyiv, 03164, e-mail: mruby@ukr.net

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

Цікавість до напівпровідникових гетероструктур з нанорозмірними об'єктами зумовлена ефектами розмірного квантування, які призводять до зміни електронного спектру. Дослідження наноструктур SiGe/Si відкривають можливості для розробки нових принципів побудови приладів нано- та оптоелектроніки, таких як детекторів середнього ІЧ та дальнього ІЧ діапазону, фотодіодів, систем пам'яті, лазерів та ін[1-5].

Гетероструктури SiGe/Si відносять до другого типу, де існує обмеження руху носіїв заряду одного знаку – дірок в валентній зоні. В гетероструктурах Ge/Si з квантовими точками

SiGe відбувається просторове розділення нерівноважних носіїв заряду – дірки захоплюються станами валентної зони SiGe, а електрони накопичуються в потенціальній ямі кремнієвого оточення Si. Як наслідок, квантові точки SiGe за низьких температур здатні накопичувати додатний заряд. За таких умов, присутність наноострівців SiGe на поверхні підкладки c-Si або розташування їх всередині півки Si має вплинути на перерозподіл густини заряду вздовж епітаксціальних шарів, що в свою чергу вплине на процеси рекомбінації носіїв заряду.

Для вивчення процесів фотогенерації та рекомбінації нерівноважних носіїв заряду в

наногетероструктурах $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ досліджувались спектральні та часові залежності поздовжньої фотопровідності.

Методика експерименту

Багатошарові Ge/Si гетероструктури з наноострівцями SiGe були вирощені методом молекулярно-променевої епітаксії [6,7] на підкладках Si (100) р-типу, легованих В, з питомим опором $7.5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$. На підкладці Si спочатку вирощувався буферний шар Si товщиною 100 нм, який легувався В з концентрацією 10^{16} см^{-3} . Домішки цієї ж концентрації були в Si підкладці. Для створення р-і-п структури вирощувались КТ Ge, висотою 2 нм, при температурі 500°C . Швидкість осадження складала 1.0 нм/хв для Si і 0.6 нм/хв для Ge. Після шару КТ вирощувався шар Si спейсера до моменту спостереження високо контрастної $\text{Si}(100)2\times 1$ картини дифракції електронів, яка є типовою для Si. Період структури, яка складалася із шару КТ і шару Si спейсера, був рівний 5. Останній шар КТ закривався шаром Si, товщиною 20 нм, який легувався Sb з концентрацією 10^{16} см^{-3} . Таким чином, вирощувались п-р структури з КТ в області потенціального бар'єру. В 19-ти шаровій гетероструктурі період складався з квантових точок $\text{Si}_{0.38}\text{Ge}_{0.62}$, висотою 1.1 нм і шарів Si, товщиною 5 нм.

Вимірювання спектральних залежностей фотопровідності проводились на базі стандартного інфрачервоного спектрометра ИКС-12 в спектральному інтервалі $0.6\text{--}1.4 \text{ еВ}$ з використанням випромінювання галогенової лампи накаливання потужністю 250 Вт.

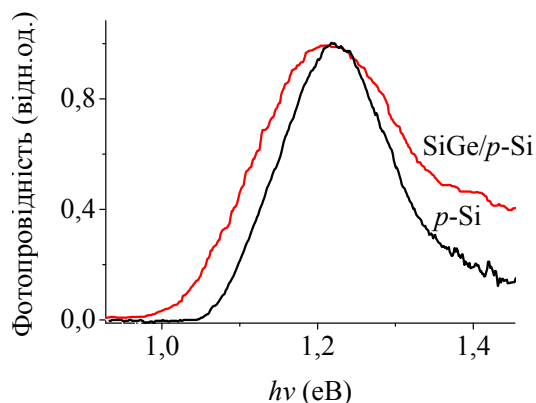


Рис. 1. Спектри поздовжньої фотопровідності при 290 К багатошарової гетероструктури з 19 шарами наноострівців SiGe висотою 2 нм та без наноострівців

Частота модуляції збуджуючого випромінювання складала 80 Гц. Для вимірювання фотоструму чи фото-ЕРС використовувався селективний підсилювач із синхронним детектуванням. Спектральні залежності приводились до постійного числа квантів з використанням неселективного піроелектричного приймача.

Результати та їх обговорення

Спектральні залежності поздовжньої фотопровідності структури Ge/Si з 19 шарами квантових точок наведено на рис. 1. Спектри виміряно при кімнатній температурі та модуляції збуджувального випромінювання з частотою 80 Гц. Фотострум з граничною енергією квантів збуджувального випромінювання $h\nu_{\text{гр}} > 1.0 \text{ еВ}$ зумовлений міжзонними переходами в Si. Для порівняння за аналогічних умов було також проведено виміри поздовжньої фотопровідності зразка р-Si, який не містив SiGe наноострівців. Форма спектра фотопровідності багатошарової структури з наноострівцями вказує на невелику ($\sim 10^3 \text{ см}^2/\text{с}$) величину швидкості поверхневої рекомбінації при 290 К.

Слід звернути увагу на відмінність форми отриманих спектральних залежностей, яка

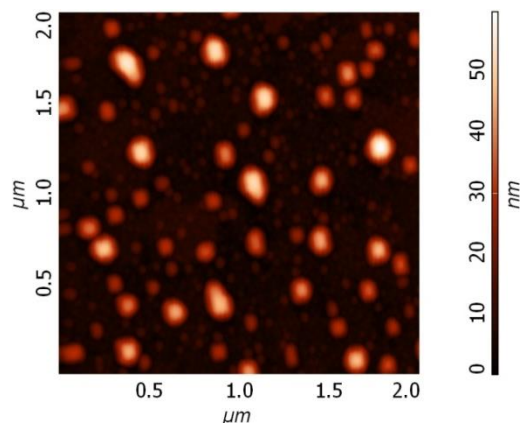


Рис. 2. АСМ зображення поверхні з наноострівцями Ge, вирощеними методом МПЕ при 500°C на поверхні підкладки р-Si (001) КДБ-7.5. (зразок 302.03.11)

полягала у спостереженні фотоструму при збудженні квантами з енергією $\sim 1.0 \text{ еВ}$ до 1.05 еВ . Такий сигнал був відсутній при вимірюванні фотопровідності р-Si структур без шарів з наноострівцями SiGe. Як відомо, сигнал фотопровідності поблизу довгохвильового края пропорційний коефіцієнту оптичного поглинання, отже відмінність спектрів ФП зумовлена насамперед його зміною. Її можуть

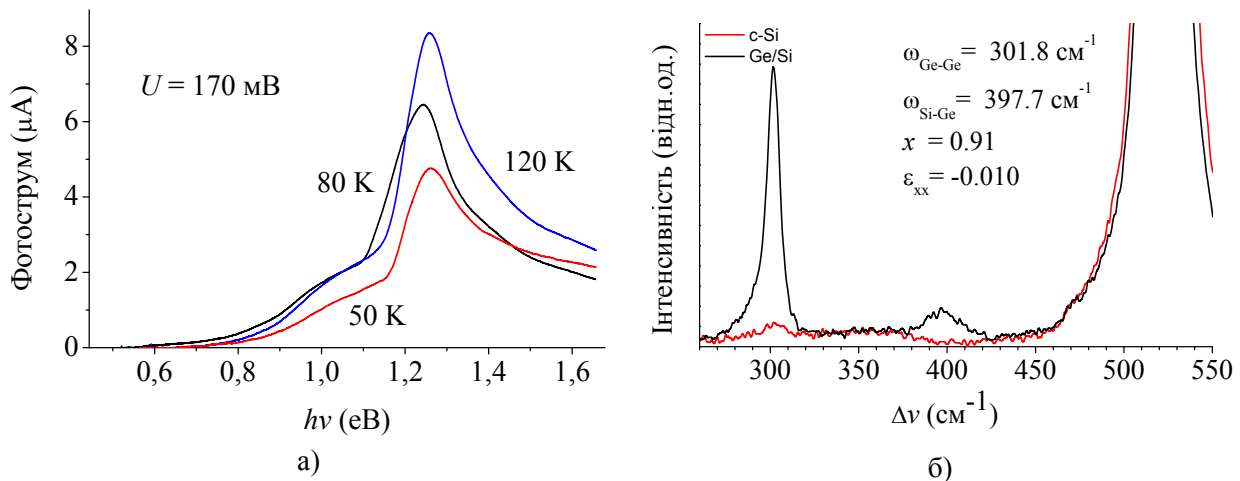


Рис. 3. Спектри поздовжньої фотопровідності (а) та спектри КРС (б) гетероструктури Si/Ge з нанострівцями Si_{1-x}Ge_x на підкладці p-Si (001) (зразок 302.03.11).

викликати неоднорідні механічні напруження в Ge/Si гетероструктурі, які максимальні в нанострівцях SiGe та їх Si оточенні. Авторами роботи [8] встановлено, що неоднорідні деформації здатні викликати помітні зміни оптичних властивостей, зумовлені зсувом електронного спектра на величину порядку 100 меВ. Розрахунки полів механічних напружень структури Ge/Si з квантовими точками Ge [9] показали, що найбільш напружена ділянка знаходиться під основою нанострівців, а величина деформації решітки кремнію вздовж площини структури зменшується при віддаленні від нанострівців. Як наслідок, зонна структура кремнієвого оточення нанострівців характеризується варіаціями в площині структури, тобто є зміннозонною. Область Si з мінімальної шириною забороненої зони, яка до того ж є меншою за ширину недеформованого c-Si, знаходиться поблизу основи нанострівців. Фотовідгук в інфрачервоній області 1.0 – 1.05 eV можна пояснити тим, що стиснені області Si поблизу нанострівців мають меншу ширину забороненої зони у порівнянні з недеформованою Si матрицею. Крім того, локальні електричні поля, зумовлені неоднорідністю оточення нанострівців, можуть виявитись досить сильними, внаслідок чого край фундаментального поглинання c-Si зазнає додаткового розмиття внаслідок ефекту Франца-Келдиша.

Просторове розділення електрон-діркових пар локальними полями здатне вплинути на темп рекомбінації носіїв, фотогенерованих в підкладці Si. Підтвердженням цього є менший спад в

короткохвильовій області спектра фотопровідності структури з нанострівцями (рис.1). Розглянемо основні закономірності фотопровідності на прикладі найпростішої гетеросистеми Si/Ge з нанострівцями Si_{1-x}Ge_x на підкладці p-Si (001). На рис. 2 наведено АСМ-зображення верхнього шару типового зразка із одним шаром нанострівців великого розміру та суттєвим розкидом за розмірами. З рисунку видно, що поверхня містить нанострівці із розміром основи приблизно 98 нм та висотою приблизно 15 нм. Середня поверхнева густина нанострівців складає $\sim 10^{10}$ см⁻². З даних спектроскопії КРС (рис. 2) визначено вміст Ge в нанострівцях $x=0.91\pm0.02$ та величину механічних напружень $\epsilon_{xx} = 0.01$.

Спектри фотопровідності (рис.3,а) виміряні при стаціонарному збудженні та температурах 50-80-120 K містили дві складові. При $h\nu > \epsilon_{g,\text{Si}}$ (1.16 eV при 50 K) основний внесок у фотопровідність давали електронно-діркові пари, фотозбуджені внаслідок міжзонних переходів в підкладці p-Si. В спектральній області, де Si є прозорим, фотопровідність обумовлена електронними переходами за участю локалізованих станів нанострівців Si_{1-x}Ge_x. При зниженні температури до 120 K спостерігалась довготривала релаксація фотоструму. На рис. 4 наведені часові залежності фотоструму, виміряні після фотозбудження квантами з $h\nu = 0.8$ eV (а) та $h\nu = 1.4$ eV (б). Після припинення освітлення струм спадає за законом:

$$I = I_0 + I_{\text{PC}} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right),$$

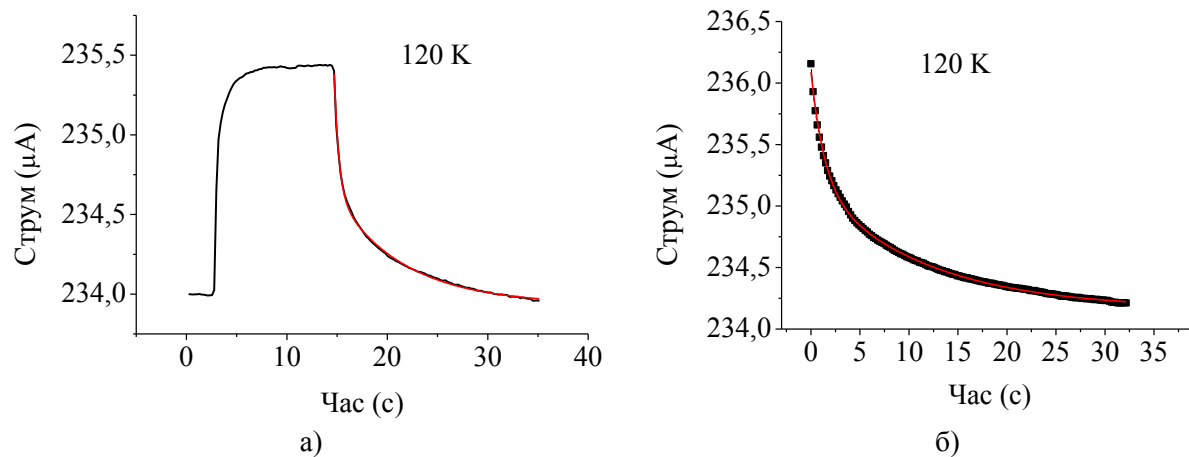


Рис. 4. Часові залежності фотоструму, виміряні після фотозбудження квантами з $h\nu = 0.8$ eВ (а) та $h\nu = 1.4$ eВ (б) гетероструктури Si/Ge з наноострівцями $Si_{1-x}Ge_x$ на підкладці p-Si (001)

де I_0 та I_{PC} - величини темного струму та стаціонарного фотоструму, відповідно, а τ - час релаксації фотозбудження, який складав $\tau = 6.8 \pm 0.2$ с та $\tau = 11.6 \pm 0.2$ с при фотозбудженні квантами $h\nu = 0.8$ eВ та $h\nu = 1.4$ eВ, відповідно. Великі значення τ , спостережувані при низьких температурах, є наслідком просторового розділення нерівноважних електронів та дірок, що сповільнює темп їх рекомбінації. Відносно швидша релаксація при фотозбудженні квантами $h\nu = 0.8$ eВ лише наноострівців $Si_{1-x}Ge_x$ є свідченням більш ефективної рекомбінації за участю станів наноострівців, у порівнянні з рекомбінацією в приповерхневому шарі збіднення підкладки p-Si.

Зменшенню темпу рекомбінації нерівноважних електронів та дірок фотогенерованих у підкладці Si, сприяють неоднорідне електричне поле з приповерхневого

шару збіднення p-Si. Це поле має такий напрямок, який сприяє дрейфу в напрямку до освітленої поверхні нерівноважних дірок, фотозбуджених внаслідок зона-зонних переходів в Si. В той самий час нерівноважні електрони заповнюють мінімуми потенціальної енергії поблизу поверхні. Просторове розділення нерівноважних носіїв заряду, при цьому, зменшує ймовірність рекомбінації та сповільнює кінетику фотоструму при зниженні температури. Спад в короткохвильовій області спектра фотопровідності, при $h\nu > 1.3$ eВ, виявився тим більший, чим вища температура. Зазвичай зменшення фотопровідності в цій області спектра пояснюється тим, що із зростанням $h\nu$ все більша частина збуджувального випромінювання поглинається в приповерхневій області Si, де є більшим темп рекомбінації в порівнянні з об'ємом підкладки. Спостережувані зміни форми спектрів вказують на те, що темп рекомбінації носіїв заряду, фотогенерованих в приповерхневому шарі підкладки Si зменшився при охолодженні, коли просторове розділення стає більш ефективним.

Аналогічні результати спостерігались при дослідженні фотопровідності в багат шарових наногетероструктурах Si/Ge. На рис. 5 наведено спектри поздовжньої фотопровідності багат шарової Si/Ge гетероструктури з 19 шарами наноострівців $Si_{0.38}Ge_{0.62}$, висотою 1.1 нм, розділених шарами кремнію шириною 5 нм. Виявилось, що зі зниженням температури в діапазоні 50 – 190 K величина фотопровідності зменшувалась в усьому спектральному діапазоні. Найбільшої зміни зазнала компонента фотопровідності, пов'язана з генерацією

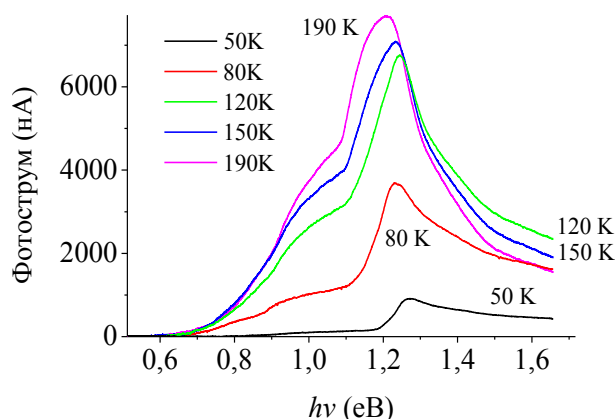


Рис. 5. Спектри поздовжньої фотопровідності багат шарової Si/Ge гетероструктури з 19 шарами наноострівців $Si_{0.38}Ge_{0.62}$, висотою 1.1 нм, розділених шарами кремнію шириною 5 нм.

електрон-діркових пар за участю квантово-розмірних станів наностріпців $\text{Si}_{0.38}\text{Ge}_{0.62}$. Так, при температурі 50 К основний внесок у спектр фотопровідності давали носії, що фотозбуджувалися в підкладці р-Si квантами з енергією $h\nu > \epsilon_{g,\text{Si}}$. Фізичною причиною цього є особливості фотогенерації і рекомбінації нерівноважних електронів та дірок в гетероструктурах II типу, до яких належить система SiGe/Si.

За умови фотозбудження нерівноважних електрон-діркових пар внаслідок непрямих в просторі електронних переходів з локалізованих станів валентної зони $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ в зону провідності Si оточення фотозбуджені дірки виявляються локалізованими в наностріпцях. Фотозбуджені електрони, при цьому, накопичуються в

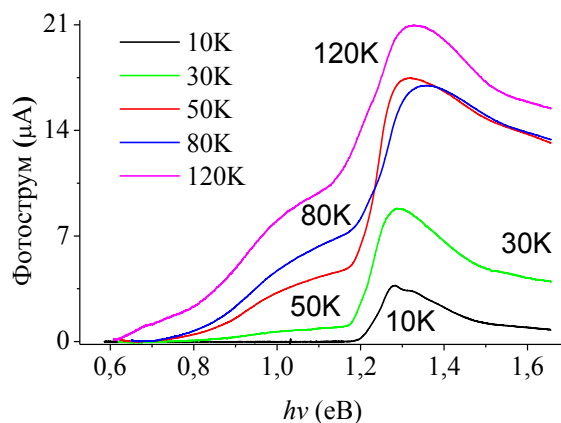


Рис. 6. Спектральні залежності поздовжньої фотопровідності 40-а періодної надгратки $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}/\text{Si}_{0.87}\text{Ge}_{0.13}$, виміряні при температурах 10-30-50-80-120 К за стаціонарного збудження.

потенціальній ямі в найближчому оточенні наностріпців.

Захоплення дірок буде тим ефективнішим, чим більша глибина потенціальної ями для дірок, що реалізується на практиці в гетероструктурах з наностріпцями $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, збагаченими Ge. Бути зміщеними в об'єм підкладки електричним полем шару збіднення, тим самим уникнувши рекомбінації з електронами в оточенні наностріпців, фотозбуджені дірки можуть лише після термічного викиду з потенціальної ями в делокалізовані стани кремнієвого оточення. Зниження температури, очевидно, зменшує ймовірність процесу емісії локалізованих дірок, що сприяє їх накопиченню в наностріпцях та підвищує ймовірність рекомбінації.

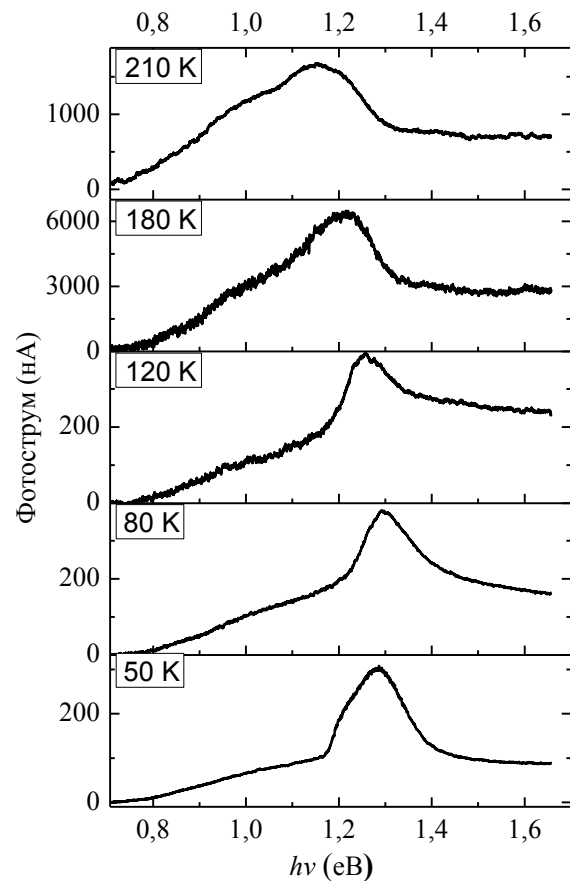


Рис. 7. Спектральні залежності поздовжньої фотопровідності р-і-п гетероструктури з квантовими точками SiGe, виміряні при температурах 50-80-120-180-210 К за стаціонарного збудження.

Поверхневий заряд захоплених надлишкових дірок впливає на величину вигину зон в підкладці р-Si. А саме, зростання додатного поверхневого заряду призведе до ще більшого збіднення в приповерхневій області просторового заряду. До того ж, напрямок електричного поля в р-Si сприяє дрейфу електронів в напрямку до поверхні, тобто в напрямку до захоплених дірок. Як наслідок, фотопровідність системи зменшується при зниженні температури при $T < 190$ К.

Порівняно зі структурою із 19 шарами наностріпців $\text{Si}_{0.38}\text{Ge}_{0.62}$, в 40-а періодній надгратці $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}/\text{Si}_{0.87}\text{Ge}_{0.13}$ без тривимірних наностріпців спад в короткохвильовій області спектра фотопровідності (рис. 6) виявився меншим. Таким чином, відсутність 2D→3D переходу обумовила меншу швидкість поверхневої рекомбінації в надгратці. Причиною

цього може бути відсутність обмеження руху дірок в поздовжньому напрямку (вздовж епітаксialних шарів). Локальні поля неоднорідностей інтерфейсу $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}/\text{Si}_{0.87}\text{Ge}_{0.13}$ сприяють просторовому перерозподілу дірок вздовж епітаксialних шарів, іншими словами розділяють в просторі нерівноважні електронно-діркові пари, зменшуючи ймовірність рекомбінації.

Створення вбудованого електричного поля в р-і-п гетероструктурі в напрямку, перпендикулярному до епітаксialних шарів, призвело до збільшення відносного внеску у фотопровідність носіїв, фотозбуджених в наноострівцях, та зменшення темпу рекомбінації носіїв, фотозбуджених в шарах і-Si (рис. 7). Фізичною причиною є просторове розділення нерівноважних електрон-діркових пар полем області просторового заряду.

Висновки

При дослідженні кінетики фотопровідності наногетероструктур Si/Ge при $T < 120$ К спостерігалась довготривала релаксація фотоструму. За умови фотозбудження лише

наноострівців $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ релаксація відбувалася швидше, що є свідченням більш ефективної рекомбінації за участі квантово-розмірних станів наноострівців у порівнянні з темпом рекомбінації електронно-діркових пар, фотогенерованих в підкладці Si.

Показано, що наноострівці SiGe, вбудовані в багатошарові структури на основі кремнію, є центрами рекомбінації електрон-діркових пар, фотогенерованих в Si і, загалом, визначають темп поверхневої рекомбінації гетероструктур. Виявилось, що при селективному фотозбудженні наноострівців рекомбінація електрон-діркових пар SiGe визначається просторовим розділенням нерівноважних носіїв заряду, коли дірки захоплюються станами валентної зони SiGe, а електрони опиняються в їх кремнієвому оточенні.

Робота виконувалась за підтримки Державного агентства з питань науки, інновацій та інформатизації України (проект № М/18 – 2013).

Список використаних джерел

1. Bruner K.. Si/Ge nanostructures // Reports on Progress in Physics. 2002. – 65, P. 27-72.
2. Dvurechenskii A.V., Yakimov A.I., Stepina N.P., Kirienko V.V., Novikov P.L.. SiGe nanodots in electro-optical SOI devices. - In: Nanoscaled Semiconductor-on-Insulator Structures and devices, ed. S. Hall, Springer, 2007. – P. 113-128.
3. Abstreiter G., Schittenhelm P., Engel C., Silveira E., Zrenner A., Meertens D.// *ager.Semicond. Sci Technol.* 1996 – Vol. **11**, – P. 1525.
4. Usami N., Ujihara T., Fujiwara K., Sazaki G., Nakajima K., Shiraki Y. Enhanced quantum efficiency of solar cells with self-assembled Ge dots stacked in multilayer structure // *Appl. Phys. Lett.* 2003, **83**, 1258.
5. Bagraev N.T., Bouravleuv A.D., Klyachkin L.E., Malyarenko A.M., Rykov S.A. Self-Ordered Microcavities Embedded in Ultra-shallow Silicon p-n Junctions // *Semiconductors*. 2000. – Vol. 34, No. 6. – P. 700-711.
6. J.M. Baribeau, X. Wu, N.L. Rowell, D.J. Lockwood. Ge dots and nanostructures grown epitaxially on Si // *Condensed Matter*. 2006/. – Vol. **18**. – P. 139-174.
7. Pchelyakov O.P., Bolkhovityanov Yu.B., Dvurechenskii A.V., Sokolov L.V., Nikiforov A.I., Yakimov A.I., Voigtländer B. Quantum dots in silicon-germanium nanostructures: mechanism of formation and electronic properties // *Semiconductor Physics and Technology*. 2000. – Vol. **34**, No. 11. – P. 1363-1367. (in Russian)
8. Dvurechenskii A.V., Yakimov A.I. Type 2Ge/Si quantum dots // *Semiconductor Physics and Technology*. 2001. – Vol. **35**, No. 9. – P. 1143-1153. (in Russian).
9. Shegai O.A., Zhuravlev K.S., Markov V.A., Nikiforov A.I., Pchelyakov O.P. Photoresistivity of Si/Ge/Si structures with germanium quantum dots // *Semiconductor Physics and Technology*. 2000. – Vol. **34**, No. 11. – P. 1363-1367. (in Russian).

Надійшла до редколегії 20.05.13

УДК 539.213; 539.1.044

Макарець М.В.¹, д-р фіз.-мат. наук, проф.
Чолій Я.В.¹, аспірант.

Рівняння для кумулянтів просторового розподілу імплантованих іонів

Отримано рівняння для кумулянтів функції просторового розподілу імплантованих іонів у рідиноподібній мішені, праві частини яких виражено через ядерне розсіяння, котре є фізичною причиною їх появи. Така форма рівнянь важлива для їх чисельного розв'язку.

Ключові слова: іон, імплантатія, розподіл, кумулянт.

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: mmv@univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Вступ

Розрахунки просторового розподілу імплантованих іонів і втрат їх енергії у твердому тілі є важливою задачею пучкових технологій і взагалі радіаційної фізики. Якщо вважати, що на одиниці шляху у мішені з атомною концентрацією N іон з початковою енергією E втрачає у зіткненнях з ядрами її атомів енергію $NS_n(E)$, а у зіткненнях з електронами – $NS_e(E)$, то це дає рівняння [1]:

$$\frac{dE}{dR} = -N(S_e(E) + S_n(E)), \quad (1)$$

з якого легко знайти повний пробіг R , однаковий для всіх іонів. Проте зіткнення випадкові, тому і траєкторії і пробіги різні. Отже існує імовірність $\Pi(\vec{r}, \vec{v}, E) d\vec{r} d\vec{v}$ знайти іон в об'ємі $d\vec{r} d\vec{v}$ навколо точки фазового простору $(\vec{r}, \vec{v})$, який стартував з енергією E з початку координат вздовж осі Oz у необмеженій однорідній мішені. Її описує кінетичне рівняння Больцмана, де в інтегралі зіткнень бінарна функція розподілу це добуток розподілу Π і розподілу центрів розсіяння.

Для застосування імплантації потрібно знати лише розподіл зупинених іонів, тобто імовірність $\Pi(\vec{r}, E) = \Pi(\vec{r}, \vec{v} \rightarrow 0, E)$. Оскільки таку границю шукати складно, то в [1] увели імовірність $\Pi(R, E) dR$ того, що іон з початковою енергією

M.V. Makarets¹, Dr. Sci., Prof.
Y.V. Choliy¹, PhD stud.

Equations for cumulants of spatial distribution of implanted ions

The equation for cumulants of the spatial distribution function of implanted ions in a liquid-like target were obtained. The right parts of these equations were expressed by using the nuclear scattering, which is of their physical cause. Such form of the equations is important for their numerical solution.

Key Words: ion, implantation, distribution cumulant.

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova Av., 4d, e-mail: redox@bigmir.net

E має шлях довжиною $R \in [0, \infty)$. Її норма рівна одиниці, а оскільки нерухомих іон лишається в точці старту, то $\Pi(R, 0) = \delta(R)$, де $\delta(x)$ – дельта-функція Дірака. Феноменологічне рівняння для $\Pi(R, E)$ отримали там же:

$$\Pi'_R(R, E) = N \int d\sigma_{n,e}(E, E') [\Pi(R, E') - \Pi(R, E)], \quad (2)$$

де Π'_R – частинна похідна по R , а $d\sigma_{n,e}(E, E')$ – сума диференціальних перерізів розсіяння іона у вказаних вище зіткненнях, у яких його енергія спадає до E' . Це рівняння Ліндхарда-Шарффа-Шіотта (ЛШШ) тривалий час було основою теоретичних досліджень розподілів іонів та втрат їх енергії при імплантації у тверде тіло.

Феноменологія виводу (2) наступна: 1) події, яка трапляється при старті іона за достовірних умов у початку координат, приписують деяку імовірність; 2) як стартову розглядають точку, нескінченно мало зміщену вздовж траєкторії, умови старту з якої мають різну імовірність; 3) вибрана подія є сумою доповнюючих подій із 2); 4) їх імовірності є добутком ймовірності ядерних та електронних зіткнень іона на зміщенні та уведеної ймовірності при старті згідно 2). Тобто в [1] вважається, що всі зіткнення відбуваються безперервно, як у суцільному середовищі.

Але атоми мішені розміщені дискретно і це потрібно врахувати у рівнянні для розподілу. Вперше це було зроблено у роботі [2], де у пункті

2) виводу, точку старту іона зміщують на відрізок l , рівний z -координаті атома мішені, на якому відбудеться його перше пружне зіткнення. Для розподілу довжини цього відрізка вводять імовірність $f_1(l)dl$, а її явний вигляд задають в

$$\begin{aligned} \Pi(\vec{r}, \vec{n}, E, \vec{E}) = & \int_0^{\infty} \int_0^{p_{\max}} \int_0^{2\pi} f_1(l) f_2(p) f_3(\varphi) \Theta(E' - \vec{E}) \Pi(\vec{r} - \vec{n}l, \vec{n}', E', \vec{E}) dldpd\varphi + \\ & + \int_0^{\infty} \int_0^{p_{\max}} \int_0^{2\pi} f_1(l) f_2(p) f_3(\varphi) \Theta(\vec{E} - E') \delta(\vec{r} - \vec{n}l) dldpd\varphi, \end{aligned} \quad (3)$$

де $\Pi(\vec{r}, \vec{n}, E, \vec{E})d\vec{r}$ – імовірність того, що в околі $d\vec{r}$ точки $\vec{r}$ іон має енергію $\vec{E}$, стартувавши з початку координат у напрямі $\vec{n}$ з енергією E ; $p_{\max} \leq a/2$ – максимальна прицільна відстань у парному пружному зіткненні з атомом всередині мішені, не більша половини міжатомної відстані a ; $\vec{n}'(\theta, \varphi)$ – орт швидкості іона після зіткнення; $\theta(p)$ – кут розсіяння іона в лабораторній системі координат; φ – кут повороту площини розсіяння; $E' = E - T_e - T_n > 0$ – енергія іона після першого пружного зіткнення; $T_e(E, l)$ – енергія, передана на шляху l електронам; $T_n(E - T_e, p)$ – енергія, передана атому мішені; p – прицільна відстань; $f_2 f_3 dpd\varphi$ – імовірність розсіяння у тілесний кут $d\theta d\varphi$ навколо $\vec{n}'$; $\Theta(x)$ – функція Хевісайда.

У [2] розглянуто моделі рідинної і газової мішеней із $f_1(l) = \delta(l - l_1)$ і $f_1(l) = \exp(-l/l_1)/l_1$, відповідно, де l_1 – середня довжина вільного пробігу іона, яку вважали сталою, або залежною від енергії. Перехід від (3) до (2) здійснювали при $l_1 \rightarrow 0$ за умови $\pi p_{\max}^2 l_1 N = 1$ і встановили, що розподіли іонів, знайдені із (2) і (3) суттєво відмінні лише при енергіях $E < 10$ кеВ.

У [3] рівняння (3) дослідили, представивши розподіл Π через кумулянти до 4-го порядку включно, а f_1 – через один кумулянт l_1 .

В даній роботі отримано рівняння, у яких праві частини виражені через ядерне розсіяння.

Рівняння для розподілу і його кумулянтів

Спростимо (3). Нас цікавлять лише зупинені іони, тому $\vec{E} = 0$ і у правій частині зникає другий доданок. Вісь Oz направимо вздовж початкової швидкості іона і введемо $\Pi(\vec{r}, E) \equiv \Pi(\vec{r}, \vec{k}, E, 0)$ з віссю симетрії Oz . Іон вперше пружно зіткнеться з випадковим атомом, тому кут φ рівномірно

рамках моделі будови середовища та процесу іон-атомного зіткнення. Тоді рівняння для функції просторового розподілу імпантованих іонів набуває наступного вигляду [2,3]:

розподілений від 0 до 2π . Згідно [4], $pdpd\varphi$ і $2\pi pdp$ – це диференціальні перерізи розсіяння у тілесні кути $d\theta d\varphi$ навколо $\vec{n}'$ і між круговими конусами з кутами θ і $\theta + d\theta$ при їх вершині, відповідно, а $\pi p_{\max}^2$ – повний переріз розсіяння. З цього і з нормування випливає: $f_2 f_3 = p/2\pi p_{\max}^2$. Введемо незалежну змінну $T_n(p)$ з нижньою межею при $p = p_{\max}$ і верхньою – при $p = 0$. Тоді імовірність розсіяння у $d\theta d\varphi$ буде відношенням диференціального і повного перерізів розсіяння: $f_2 f_3 dpd\varphi = d\sigma_n(E - T_e, T_n) d\varphi / 2\pi \sigma_n(E - T_e, T_{\min})$.

Після цих спрощень (3) набуває вигляду:

$$\Pi(\vec{r}, E) = \int_0^{\infty} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \int_0^{2\pi} \Pi(\vec{r}', E') f_1 dl \frac{d\sigma_n}{\sigma_n} \frac{d\varphi}{2\pi}, \quad (4)$$

де $\vec{r}' = \hat{A}(\vec{r} - \vec{k}l)$ – координата точки зупинки іона у системі координат, зміщений на $\vec{k}l$ і повернутий на кути φ навколо осі Oz і θ навколо нової осі Oy , $\hat{A}(\theta, \varphi)$ – матриця цих поворотів [3], а аргументи деяких функцій не виписані. Рівняння (4) і є предметом досліджень даної роботи.

Згідно [5], функцію розподілу виразимо через її другу характеристичну функцію $\Phi(\vec{\omega}, E)$:

$$\Pi(\vec{r}, E) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{r} + \Phi(\vec{\omega}, E)) d^3 \vec{\omega}, \quad (5)$$

де $\vec{\omega} = (u, v, w)$ – координати Фур'є-простору, а крапка позначає скалярний добуток вектор-рядка і вектор-стовпчика.

Якщо підставити (5) у (4), у правій частині зробити заміну $\vec{\omega}' = \vec{\omega} \hat{A}^{-1}$, де $\det \hat{A} = 1$, зібрати всі доданки в лівій частині, то отримаємо рівняння для $\Phi(\vec{\omega}, E)$, яке можна записати у вигляді:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{r}) G(\vec{\omega}, E) d\vec{\omega} = 0, \quad \forall \vec{r}, \quad (6) \quad \text{де введено позначення:}$$

$$G(\vec{\omega}, E) = \exp(\Phi(\vec{\omega}, E)) - \int_0^{\infty} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \int_0^{2\pi} \exp(ilw + \Phi(\vec{\omega} \hat{A}^{-1}, E')) f_1 dl \frac{d\sigma_n}{\sigma_n} \frac{d\varphi}{2\pi} \quad (7)$$

і не виписані аргументи деяких функцій. Ліва частина (6) є Фур'є-перетворенням $G(\vec{\omega}, E)$, яке дорівнює нулю лише коли $G(\vec{\omega}, E) \equiv 0$. Ця умова і є рівнянням для функції $\Phi(\vec{\omega}, E)$, яка є твірною для кумулянтів розподілу. В силу його осової симетрії, вона має таку ж симетрію, тому її розклад в ряд Тейлора має вигляд [5,6]:

$$\Phi(\vec{\omega}, E) = \sum_{N=1}^{\infty} i^N \sum_{n=0}^{[N/2]} \kappa_{2n, N-2n}(E) \frac{\rho^{2n} w^{N-2n}}{(2n)!(N-2n)!}, \quad (8)$$

де $\rho^2 = u^2 + v^2$, N – порядок кумулянта, $[x]$ – ціла частина x . Оскільки $G(\vec{\omega}, E) \equiv 0$, то всі коефіцієнти її ряду Тейлора навколо точки $\vec{\omega} = 0$ будуть дорівнювати нулю. Отже маємо умову:

$$\left. \frac{\partial^{2i+j} G(\vec{\omega}, E)}{\partial \rho^{2i} \partial w^j} \right|_{\vec{\omega}=0} = 0, \quad (9)$$

$$\begin{cases} \kappa_{02} + \kappa_{01}^2 = \int_0^{\infty} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \{ \kappa_{02} \cos^2(\theta) + \kappa_{20} \sin^2(\theta) + \kappa_{01}^2 \cos^2(\theta) + 2l\kappa_{01} \cos(\theta) \} f_1 dl \frac{d\sigma_n}{\sigma_n} + l_2, \\ \kappa_{20} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \{ \kappa_{02} \sin^2(\theta) + \kappa_{20} (1 + \cos^2(\theta)) + \kappa_{01}^2 \sin^2(\theta) \} f_1 dl \frac{d\sigma_n}{\sigma_n}, \end{cases} \quad (11)$$

де кумулянти в лівій частині залежать від E , а у правій – від E' , а l_2 – другий момент f_1 .

В (11) невідомі функції входять під інтеграли обох рівнянь системи, що ускладнює її розв'язок. Проведене дослідження рівнянь для кумулянтів порядку $N \geq 2$ показало, що вони утворюють системи N інтегральних лінійних неоднорідних рівнянь наступного вигляду:

$$\vec{\kappa}_N(E) = \int_0^{\infty} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \hat{F}_N \vec{\kappa}_N(E') f_1 dl \frac{d\sigma_n}{\sigma_n} + \vec{G}_N, \quad (12)$$

де $\vec{\kappa}_N$ – вектор-стовпчик із K_N кумулянтів N -го порядку κ_{nl} , впорядкований за спаданням l , $\hat{F}_N(\theta)$ – матриця розміру $K_N \times K_N$ із залежними від θ елементами, $K_N = [N/2] + 1$, $\vec{G}_N$ – вектор із K_N функцій, залежних від кумулянтів і моментів

з якої, після підстановки (7) і (8), перетворень та обчислення інтегралів по куту φ , випливають рівняння для кумулянтів. Знайдемо їх.

Згідно [5], проективний пробіг іона, або ж середнє значення z , це кумулянт 1-го порядку κ_{01} . Тому з (9), при $i = 0$ та $j = 1$, отримаємо:

$$\kappa_{01}(E) = \int_0^{\infty} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \kappa_{01}(E') \cos(\theta) f_1 dl \frac{d\sigma_n}{\sigma_n} + l_1, \quad (10)$$

де l_1 – середня довжина пробігу іона до першого пружного зіткнення. В силу симетрії $\kappa_{10}(E) = 0$.

Для кумулянтів N -го порядку із (9) впливає система N рівнянь з кумулянтами і моментами функції f_1 до N -го порядку. Зокрема, для $N = 2$, в силу симетрії $\kappa_{11}(E) = 0$, а поздовжній $\kappa_{02}(E)$ і поперечний $\kappa_{20}(E)$ страгглінги розподілу іонів, задовольняють системі рівнянь:

f_1 до $(N-1)$ -го порядку. Наприклад, вектори $\vec{\kappa}_2 = (\kappa_{02} \ \kappa_{20})^T$, $\vec{\kappa}_3 = (\kappa_{03} \ \kappa_{21})^T$, матриці

$$\hat{F}_2 = \begin{pmatrix} \cos^2(\theta) & \sin^2(\theta) \\ \frac{1}{2} \sin^2(\theta) & \frac{1}{2} (1 + \cos^2(\theta)) \end{pmatrix},$$

$$\hat{F}_3 = \begin{pmatrix} \cos^3(\theta) & 3\cos(\theta)\sin^2(\theta) \\ \frac{1}{2} \cos(\theta)\sin^2(\theta) & -\frac{1}{2} (1 - 3\cos^2(\theta)) \end{pmatrix},$$

а вектор $\vec{G}_2$ можна явно виділити із (11).

Виявилося, що власні числа матриці $\hat{F}_N(\theta)$ є поліномами Лежандра $P_l(\cos \theta)$, а власні вектори – сталими. Тому праву частину (12) можна діагоналізувати заміною $\vec{\kappa}_N = \hat{M}_N \vec{\eta}_N$, де стовпці матриці $\hat{M}_N$ це власні вектори $\hat{F}_N$, а $\vec{\eta}_N(E)$ – так звані ерзацкумулянти [5]. Тоді отримуємо:

$$\vec{\eta}_N(E) = \int_0^{T_{\max}} \int_{T_{\min}} \left\{ \hat{F}_N^d \vec{\eta}_N(E') \right\} f_1 dl \frac{d\sigma_n}{\sigma_n} + \vec{G}_N, \quad (13)$$

де $\hat{F}_N^d \equiv \hat{M}_N^{-1} \hat{F}_N \hat{M}_N$ – діагональна форма матриці $\hat{F}_N$, $\vec{G}_N = \hat{M}_N^{-1} \vec{G}_N (\hat{M}_{N-1} \vec{\eta}_{N-1}, \dots, \hat{M}_1 \vec{\eta}_1, l_N, \dots, l_1)$.

Норми власних векторів матриць $\hat{F}_N$ вибирали так, щоб вирази для компонент вектора $\vec{G}_N$ були найменшими. Таким чином знайшли матриці:

$$\hat{M}_2 = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{M}_3 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

та інші, до 6-го порядку включно. Зауважимо, що описані перетворення для $N \geq 2$ надзвичайно громіздкі, тому значну їх частину проводили методами комп'ютерної алгебри.

$$\int_0^\infty \left\{ \eta_{lm}(E) - \eta_{lm}(E - T_e) \right\} f_1 dl - \int_0^\infty \frac{f_1(l) dl}{\sigma_n(E - T_e)} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \frac{\partial}{\partial T_n} \left\{ \eta_{lm}(E - T_e - T_n) P_m(\cos \theta) \right\} \tilde{\sigma}_n(E', T_n) dT_n = \tilde{G}_{lm} \quad (16)$$

де $\tilde{\sigma}_n(E', T_n)$ – сумарний переріз розсіяння із втратою енергії від T_n до $T_{\max}$, введений у [5].

Переходимо у (16) до безрозмірної енергії і довжини згідно [5]. Тоді зв'язок між середньою довжиною пробігу іона до першого пружного зіткнення і повним перерізом розсіяння має вигляд $\lambda_1 = \gamma / \sigma_n(\varepsilon - \tau_e(\varepsilon, \lambda_1))$, де $\gamma = 4\mu / (1 + \mu)^2$, а μ – відношення маси іона і маси атома мішені.

$$\hat{L} \chi_{lm} \equiv \int_0^\infty \left\{ \chi_{lm}(\varepsilon) - \chi_{lm}(\varepsilon') \right\} f_1(\lambda) d\lambda - \int_0^\infty \frac{f_1 d\lambda}{\sigma_n(\varepsilon')} \int_0^{\gamma \varepsilon'} \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ \chi_{lm}(\varepsilon' - \tau) P_m(\cos \theta) \right\} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon', \tau) d\tau, \quad (18)$$

ε , $\tau_e(\varepsilon, \lambda)$ і τ – безрозмірні початкова енергія іона, втрати енергії на електронне гальмування і у пружному зіткненні, відповідно, $\varepsilon' = \varepsilon - \tau_e$, λ і λ_1 – безрозмірний шлях іона до першого зіткнення і його середнє значення, відповідно, $\tilde{G}_{01} = \lambda_1$, наступні дві функції мають вигляд:

$$\begin{cases} \tilde{G}_{02} = \int_0^\infty \left\{ (\chi_{01}(\varepsilon') + \lambda)^2 - \chi_{01}^2(\varepsilon) \right\} f_1 d\lambda + \int_0^\infty \frac{f_1 d\lambda}{\sigma_n(\varepsilon')} \int_0^{\gamma \varepsilon'} \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ \chi_{0,1}^2(\varepsilon' - \tau) P_2 + 2\lambda \chi_{0,1}(\varepsilon' - \tau) P_1 \right\} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon', \tau) d\tau, \\ \tilde{G}_{20} = \int_0^\infty \left\{ (\chi_{01}(\varepsilon') + \lambda)^2 - \chi_{01}^2(\varepsilon) \right\} f_1 d\lambda + \int_0^\infty \frac{f_1 d\lambda}{\sigma_n(\varepsilon')} \int_0^{\gamma \varepsilon'} \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ \chi_{0,1}^2(\varepsilon' - \tau) + 2\lambda \chi_{0,1}(\varepsilon' - \tau) P_1 \right\} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon', \tau) d\tau, \end{cases} \quad (19)$$

де $P_l \equiv P_l(\cos \theta)$, $\theta(\varepsilon', \tau)$ – кут розсіяння іона. Функції $\tilde{G}_{km}$ вищих порядків занадто громіздкі, тому їх буде наведено далі.

Отримані вирази справедливі для довільної функції розподілу $f_1(l)$. Проведені дослідження

Рівняння для ерзацкумулянтів

Тепер для ерзацкумулянта $\eta_{lm}(E)$ можна записати загальний вигляд рівняння у випадку парного індекса l і довільного m :

$$\eta_{lm}(E) = \int_0^{T_{\max}} \int_{T_{\min}} \eta_{lm}(E') P_m(\cos \theta) f_1 dl \frac{d\sigma_n}{\sigma_n} + \tilde{G}_{lm}, \quad (15)$$

де серед аргументів описаної вище функції $\tilde{G}_{lm}$ є кумулянти лише меншого порядку ніж $l + m$.

Тепер інтеграл по $d\sigma_n$ беремо по частинах, враховуємо, що $d\sigma_n/dT_n < 0$ і $\sigma_n(E, T_{\max}) = 0$, та покладаємо $T_{\min} = 0$, тому $\theta(T_{\min}) = 0$ і $P_m(1) = 1$ для всіх m . Після перетворень отримаємо рівняння:

Після цих перетворень отримуємо ланцюжок наступних рівнянь:

$$\hat{L} \chi_{2n, N-2n}(\varepsilon) = \tilde{G}_{2n, N-2n}, \quad (17)$$

де χ_{ij} – безрозмірні кумулянти розподілу, $N \geq 1$, $n \geq 0$ і $N - 2n \geq 0$, дія оператора у лівій частині задається наступним чином:

показали, що їх можна спростити далі лише задавши явно цю функцію. Для рідинної моделі мішені це було зроблено у [3], а в даній роботі вдалося знайти ще одне їх спрощення.

Після підстановки $f_1(\lambda) = \delta(\lambda - \lambda_1)$ в (17-19), спрощень, отримали наступні рівняння для ділення кожного із них на λ_1 і алгебраїчних кумулянтів до третього порядку включно:

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\chi_{01} - \chi'_{01}}{\lambda_1} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma}_n \frac{\partial}{\partial \tau} \{ \chi''_{01} P_1 \} d\tau = 1, \\ & \frac{\chi_{02} - \chi'_{02}}{\lambda_1} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma}_n \frac{\partial}{\partial \tau} \{ \chi''_{02} P_2 \} d\tau = \frac{\tilde{\chi}_{01}'^2 - \chi_{01}^2}{\lambda_1} + \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma}_n \frac{\partial}{\partial \tau} \{ \chi''_{01}^2 P_2 + 2\lambda_1 \chi''_{01} P_1 \} d\tau, \\ & \frac{\chi_{20} - \chi'_{20}}{\lambda_1} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma}_n \frac{\partial}{\partial \tau} \{ \chi''_{20} \} d\tau = \frac{\tilde{\chi}_{01}'^2 - \chi_{01}^2}{\lambda_1} + \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma}_n \frac{\partial}{\partial \tau} \{ \chi''_{01}^2 + 2\lambda_1 \chi''_{01} P_1 \} d\tau, \\ & \frac{\chi_{03} - \chi'_{03}}{\lambda_1} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma}_n \frac{\partial}{\partial \tau} \{ \chi''_{03} P_3 \} d\tau = \frac{\tilde{\chi}_{01}'^3 - \chi_{01}^3 + 3\tilde{\chi}_{01}'\chi'_{02} - 3\chi_{02}\chi_{01}}{\lambda_1} + \\ & \quad + \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma}_n \frac{\partial}{\partial \tau} \{ \chi''_{01} (\chi''_{01}^2 + 3\chi''_{02}) P_3 + 3(\chi''_{01}^2 + \chi''_{02}) \lambda_1 P_2 + 3\chi''_{01} \lambda_1^2 P_1 \} d\tau, \\ & \frac{\chi_{21} - \chi'_{21}}{\lambda_1} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma}_n \frac{\partial}{\partial \tau} \{ \chi''_{21} P_1 \} d\tau = \frac{\tilde{\chi}_{01}'^3 - \chi_{01}^3 + \frac{4}{3}(\tilde{\chi}_{01}'\chi'_{02} - \chi_{01}\chi_{02}) + \frac{5}{3}(\tilde{\chi}_{01}'\chi'_{20} - \chi_{01}\chi_{20})}{\lambda_1} + \\ & \quad + \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma}_n \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ \chi''_{01}^3 P_1 + 3\chi''_{01} \lambda_1^2 P_1 + \frac{4}{3}(\chi''_{01}^2 \lambda_1 P_2 + \chi''_{01} \chi''_{02} P_1 + \chi''_{02} \lambda_1 P_2) + \right. \\ & \quad \left. + \frac{5}{3}(\chi''_{01}^2 \lambda_1 + \chi''_{01} \chi''_{20} P_1 + \chi''_{20} \lambda_1) \right\} d\tau, \end{aligned} \right. \quad (20)$$

де $\chi_{km} \equiv \chi_{km}(\epsilon)$, $\chi'_{km} \equiv \chi_{km}(\epsilon')$, $\tilde{\chi}'_{km} \equiv \chi_{km}(\epsilon') + \lambda_1$ і $\chi''_{km} \equiv \chi_{km}(\epsilon' - \tau)$.

Всі доданки (20) залежать від середнього пробігу іона до першого пружного зіткнення λ_1 , а він, у свою чергу, від перерізу ядерного розсіяння σ_n і від втрат енергії на електронне гальмування τ_e . Але при $\lambda_1 \rightarrow 0$ $\tau_e = \lambda_1 s_e(\epsilon)$, алгебраїчні доданки стають пропорційними s_e і описують вклад лише гальмування, а інтегральні доданки – вклад лише пружного розсіяння, бо у них $\epsilon' \rightarrow \epsilon$. Зважаючи на це, далі будемо називати алгебраїчні доданки вкладом

електронного гальмування, а інтегральні вирази – ядерного розсіяння.

Якщо тепер з першого рівняння (20) виразити вклад гальмування через розсіяння і підставити у друге і третє, то у них права частина буде мати лише доданки з розсіянням. Аналогічно можна виразити вклад гальмування у кумулянти 2-го порядку і підставити у рівняння для кумулянтів 3-го порядку разом із попереднім виразом. Діючи аналогічно і далі, можна отримати ланцюжок рівнянь, у яких неоднорідність буде зумовлена вкладом лише розсіяння. При цьому перше рівняння не зміниться, а для $N=2,3$ вони набувають наступного вигляду:

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\chi_{02} - \chi'_{02}}{\lambda_1} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma} d \{ \chi''_{02} P_2 \} = \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma} d \{ \chi''_{01}^2 P_2 - \chi''_{01} [\chi'_{01} + \chi_{01} - \lambda_1] P_1 \}, \\ & \frac{\chi_{20} - \chi'_{20}}{\lambda_1} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma} d \{ \chi''_{20} \} = \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma}_n d \{ \chi''_{01}^2 - \chi''_{01} [\chi'_{01} + \chi_{01} - \lambda_1] P_1 \}, \\ & \frac{\chi_{03} - \chi'_{03}}{\lambda_1} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma} d \{ \chi''_{03} P_3 \} = \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma} d \left\{ \chi''_{01} (\chi''_{01}^2 + 3\chi''_{02}) P_3 - 3(\chi_{01} - \lambda_1) (\chi''_{01}^2 + \chi''_{02}) P_2 + \right. \\ & \quad \left. - \chi''_{01} (\chi_{01}^2 + 3\chi'_{02} - 2(\chi_{01} - \lambda_1)(\chi'_{01} + \chi_{01} - \lambda_1)) P_1 \right\}, \\ & \frac{\chi_{21} - \chi'_{21}}{\lambda_1} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma} d \{ \chi''_{21} P_1 \} = \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\epsilon'} \tilde{\sigma} d \left\{ \chi''_{01} \left[\chi''_{01}^2 - \chi_{01}^2 + \frac{4}{3}(\chi''_{02} - \chi'_{02}) + \frac{5}{3}(\chi''_{20} - \chi'_{20}) + \right] P_1 - \right. \\ & \quad \left. - (\chi_{01} - \lambda_1) \left[\frac{4}{3}(\chi''_{01}^2 + \chi''_{02}) P_2 + \frac{5}{3}(\chi''_{01}^2 + \chi''_{20}) \right] \right\}, \end{aligned} \right. \quad (21)$$

де $\tilde{\sigma} \equiv \tilde{\sigma}_n(\varepsilon', \tau)$, а $d\{\dots\}$ – позначає диференціал по змінній інтегрування τ від виразу у дужках. Рівняння для кумулянтів вищого порядку тут не наведено, зважаючи на їх громіздкий вигляд.

Дослідження і обговорення.

Покажемо, що вигляд рівнянь (21) відображає фізичний механізм появи вищих кумулянтів розподілу імплантованих іонів.

Для цього спочатку розглянемо ланцюжок (20) за відсутності ядерного розсіювання, для чого покладемо $\tilde{\sigma}_n(\varepsilon', \tau) = 0$ і виконаємо граничний перехід $\lambda_1 \rightarrow 0$. Після нескладних спрощень отримаємо рівняння:

$$s_e(\varepsilon) \frac{\partial \chi_{01}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = 1, \quad \frac{\partial \chi_{2k, N-2k}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = 0, \quad (22)$$

де $N > 1$, $k \geq 0$ і $N - 2k \geq 0$. Для всіх цих рівнянь початкові умови нульові, що випливає із умови $\Pi(\vec{r}, 0) = \delta(\vec{r})$. Тому розподіл має лише перший кумулянт, а всі інші рівні нулю. Отже розподіл іонів вздовж безрозмірних пробігів ρ буде задаватися дельта-функцією Дірака $\delta(\rho - \chi_{01}(\varepsilon))$ лише з одним відмінним від нуля кумулянтом.

Поява вищих незалежних кумулянтів буде зумовлена випадковими пружними зіткненнями. Щоб показати це, зробимо граничний перехід $\lambda_1 \rightarrow 0$ у (21) та у першому рівнянні (20), а потім – розклад до першого порядку по τ всіх виразів у фігурних дужках під інтегралами. Таким чином будуть враховані електронні втрати і ядерне розсіювання у найнижчому наближенні. Після нескладних, але громіздких перетворень отримаємо наступний ланцюжок рівнянь:

$$\begin{cases} s_t \frac{\partial \chi_{01}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = 1, \\ s_t \frac{\partial \chi_{2k, N-2k}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \approx \mu_N \left[\left(\frac{\partial \chi_{01}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)^N + \dots \right], \end{cases} \quad (23)$$

де $s_t = s_e(\varepsilon) + s_n(\varepsilon)$ – повне гальмування іона, $N > 1$, $k \geq 0$ і $N - 2k \geq 0$, $\mu_N(\varepsilon)$ – N -ий момент ядерного розсіювання, а решта доданків у квадратних дужках пропущені. Для цих рівнянь початкові умови нульові, аналогічно до (22). Якщо із першого рівняння (23) виразити похідну першого кумулянта і підставити у друге, то отримаємо оцінку:

$$\frac{\partial \chi_{2k, N-2k}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \approx \frac{\mu_N(\varepsilon)}{s_t(\varepsilon)^{N+1}} + \dots, \quad (24)$$

звідки випливає, що у наближенні першого порядку по втратах енергії у пружному розсіянні кумулянт N -го порядку просторового розподілу імплантованих іонів пропорційний моменту ядерного розсіювання N -го порядку. Хоча з точних рівнянь (21) видно, що кумулянт визначається електронним гальмуванням і всіма моментами ядерного розсіювання, проте вони впливають лише на його залежність від енергії, у той час як амплітуда його змін буде пропорційна вказаному моменту.

Висновки та результати

Вперше отримано інтегральні рівняння для кумулянтів функції просторового розподілу імплантованих іонів у мішені рідинного типу з правими частинами пропорційними ядерному розсіянню, яке є причиною їх виникнення.

Практична важливість полягає у тому, що їх тепер можна дослідити чисельними методами, розвинутих у роботах [5,6], які придатні для всього діапазону енергій, що використовуються у сучасній імплантації та наукових дослідженнях.

Список використаних джерел

1. Lindhard J., Scharf M., Schiött H.E. Range Concepts and Heavy Ion ranges (Notes on Atomic Collisions, II) // Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Medd. – 1963. – В.33, №14. – Р.1-52.
2. Bowyer M.D.J., Ashworth D.G., Owen R. A generalized transport equation for ion implantation into infinite targets // J. Phys. Appl. Phys. – 1994. – V.27, №12. – Р.2592-2600.
3. Makarets M., Yukhymenko O. Equation for spatial distribution of implanted ions and its cumulants // Visn., Ser. Fiz., Kyiv Univ. im. Tarasa Shevchenka. – 2011. – В 12. – Р. 34-41. (in Ukrainian).
4. Landau L.D., Lifshitz E.M. Mechanics. Vol. 1 (1976).
5. Ilyina V.V., Makarets M.V. The cumulants analysis of the implanted ions distribution // Ukr. Phys. J. – 2004. – V.49, №8. – Р. 815-823.
6. Ilyina V.V., Makarets M.V. Distribution of energy losses by fast ions along their propagation paths in solids. // Ukr. J. Phys. – 2010. – V. 55, N 2, – Р. 235-242.

Надійшла до редколегії: 09.09.13

УДК 533.9

Момот А.І., к.ф.-м.н.

Аналіз механізмів згасання іонно-звукових хвиль у запорошеній плазмі

Виконаний числовий розв'язок дисперсійного рівняння в області іонно-звукових коливань. В обчисленнях використовувались вирази для поздовжньої діелектричної проникності отримані в рамках кінетичної теорії запорошеної плазми з урахуванням самоузгодженого заряджання порошинок за рахунок поглинання електронів та іонів. Представленні дисперсійні криві та залежності декременту згасання від хвильового вектора. Проведений аналіз вкладу двох основних механізмів, які спричиняють зміну дисперсії та згасання іонно-звукових хвиль: самоузгоджене заряджання порошинок і зниження електронної концентрації.

Ключові слова: запорошена плазма, іонно-звукові хвилі, дисперсійне рівняння, самоузгоджене заряджання.

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, фізичний факультет, 03022,
м. Київ, пр-т Глушкова 2,
e-mail: momot@univ.kiev.ua

A.I. Momot, Ph.D.

Analysis of ion-acoustic waves damping mechanisms in dusty plasma

The numerical solution of the dispersion equation in the domain of ion-acoustic vibrations is performed. The expressions for longitudinal dielectric permittivity obtained in the framework of kinetic theory of dusty plasma with regard to self-consistent charging of dust particles due to plasma particles absorption were used in the computations. Dispersion curves and damping rates are presented. The analysis of two main mechanisms (self-consistent grain charging and decrease of electron density) influence on ion-acoustic wave dispersion and damping is done.

Key Words: dusty plasma, ion-acoustic waves, dispersion equation, self-consistent charging.

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
Faculty of Physics, 03022, Kyiv Glushkova st, 2,
e-mail: momot@univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Відомо, що присутність твердотільних дрібних домішок (порошинок) може суттєво впливати на електродинамічні та кінетичні властивості плазми. Зокрема, це стосується і хвиль у плазмі. Одна з головних причин впливу порошинок на колективні процеси у плазмі є поглинання ними електронів та іонів, які стикаються з поверхнею порошинок. Поглинання призводить до появи потоків плазових частинок до поверхні порошинки. Так як теплова швидкість електронів набагато більша за теплову швидкість іонів, то порошинки заряджаються від'ємно. У стаціонарному стані іонний та електронний струми на порошинку є рівними. Таке заряджання є самоузгодженим, оскільки заряд порошинки визначається плазовими потоками, які в свою чергу залежать від заряду. Збурення розподілу електронів та іонів призводить до збурення заряду порошинки і, отже, до додаткового відгуку плазми на електромагнітне поле. Заряд порошинки

мікронного розміру може досягати 10^5 зарядів електрона, тому присутність порошинок суттєво знижує концентрацію електронів у плазмі.

Останні 20 років питання розповсюдження хвиль у запорошеній плазмі викликає значний інтерес [1-3] який не вщухає і зараз [4,5], опубліковано багато статей, що розглядають як теоретичні так і експериментальні аспекти цього питання. Однак, у багатьох цих роботах використовувався спрощений підхід у рамках гідродинамічної моделі. Кінетична теорія електромагнітних процесів у запорошеній плазмі з урахуванням самоузгодженого заряджання порошинок була запропонована в [6]. В роботі [7] ця теорія була узагальнена на випадок плазми з порошинками різних розмірів. Присутність таких порошинок у природній плазмі є швидше правилом, ніж виключення. Також у [7] проведено числове дослідження розповсюдження іонно-звукових хвиль і виявлено суттєвий вплив пилової компоненти як на їх дисперсію так і на

згасання. Але не виконаний аналіз вкладу двох основних механізмів, які спричиняють зміну дисперсії та згасання: самоузгоджене заряджання порошинок і зниження електронної концентрації. Тому метою даної роботи є вивчення окремого впливу цих механізмів на розповсюдження іонно-звукових хвиль у запорошеній плазмі.

Вираз для поздовжньої діелектричної проникності плазми без зіткнень, отриманий з кінетичного рівняння Власова, має вигляд [8]

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = 1 + \sum_{\alpha} \frac{k_{D\alpha}^2}{k^2} W\left(\frac{\omega}{k v_{T\alpha}}\right), \quad (1)$$

де індекс α позначає сорт плазмових частинок ($\alpha = e$ – електрон, $\alpha = i$ – іон), $v_{T\alpha} = \sqrt{T_{\alpha}/m_{\alpha}}$ – теплова швидкість частинок, $k_{D\alpha}^2 = 4\pi e^2 n_{\alpha}/T_{\alpha}$, e_{α} – заряд плазмової частини, $e_e = -e$, $e_i = e$, тобто іони є однозарядними. Тут

$$W(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x e^{-x^2/2}}{x - y - i0} dx \quad (2)$$

є плазмовою дисперсійною функцією, яка аналітична при $\text{Im } y \geq 0$ і може бути аналітично продовжена на всю комплексну площину на основі представлення

$$W(y) = 1 - \sqrt{2} y e^{-y^2/2} \int_0^{y/\sqrt{2}} e^{x^2/2} dx + i \sqrt{\frac{\pi}{2}} y e^{-y^2/2}. \quad (3)$$

Умовою існування власних поздовжніх коливань у середовищі є рівняння

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = 0, \quad (4)$$

яке визначає залежність частоти власних коливань ω від хвильового вектора $\mathbf{k}$. Як видно, поздовжня діелектрична проникність є комплексною величиною, тому при дійсному $\mathbf{k}$ власна частота буде комплексною $\omega + i\gamma$, де γ – декремент згасання. Згасання хвиль у плазмі без зіткнень називають згасанням Ландау, воно спричинене резонансною взаємодією поля хвилі з плазмовими частинками, тобто взаємодією з частинками швидкість теплового руху яких близька до фазової швидкості хвилі.

З літератури давно відомі наближені аналітичні розв'язки рівняння (4) для діелектричної проникності (1). Метою цієї роботи є отримання точних числових розв'язків, для цього зручно переписати (1) у безрозмірних змінних

$$\varepsilon\left(\frac{k}{k_{Di}}, \frac{\omega + i\gamma}{\omega_{pi}}\right) = 1 + \frac{1}{(k/k_{Di})^2} W\left(\frac{\omega/\omega_{pi} + \gamma/\omega_{pi}}{k/k_{Di}}\right) + \frac{T_i}{T_e} \frac{n_e/n_i}{(k/k_{Di})^2} W\left(\frac{\omega/\omega_{pi} + \gamma/\omega_{pi}}{k/k_{Di}} \sqrt{\frac{T_i m_e}{T_e m_i}}\right), \quad (5)$$

де $\omega_{pi} = \sqrt{4\pi e^2 n_i / T_i}$ – плазмова іонна частота. Рівняння (5) залежить від наступних параметрів: відношення температур електронів та іонів, відношення їх концентрацій а також відношення маси електрона до іона. У експериментах із запорошеною плазмою зазвичай $T_i/T_e \ll 1$, тобто плазма є сильно неізотермічною. Обчислення, результати яких будуть наведені далі, проводились для випадку водневої плазми ($m_i/m_e = 1836$). Концентрації плазмових частинок пов'язані умовою квазінейтральності плазми

$$e_e n_e + e_i n_i + Q = 0, \quad (6)$$

де Q – це заряд накопичений на порошинках, звідси $n_e/n_i = 1 - P$, де $P = Q/e_e n_i$ – так званий параметр Хавнеса, який характеризує кількість електронного заряду накопичена на порошинках. Для плазми без порошу $P = 0$, тому концентрації електронів та іонів є рівними.

Отже, використовуючи в обчисленнях вираз для діелектричної проникності плазми без порошинок (5), але з $n_e/n_i = 1 - P$ буде враховано вплив порошинок на іонно-звукові хвилі лише за рахунок зміни концентрації електронів та іонів.

Як видно з рис. 1 зменшення концентрації електронів призводить до помітної зміни

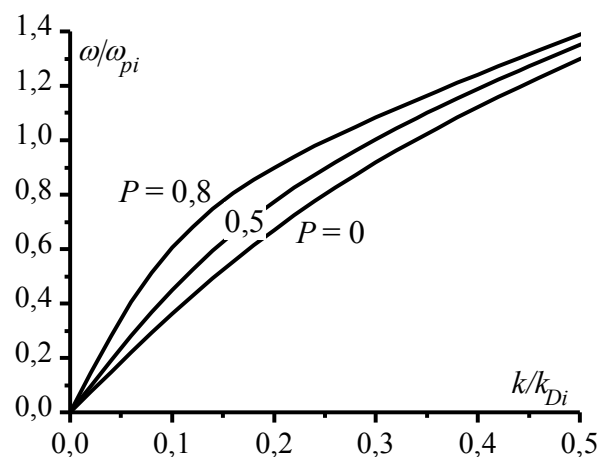


Рис. 1. Дисперсійні залежності для іонно-звукових хвиль у плазмі при $T_i/T_e = 0,1$ і $P = 0; 0,5; 0,8$.

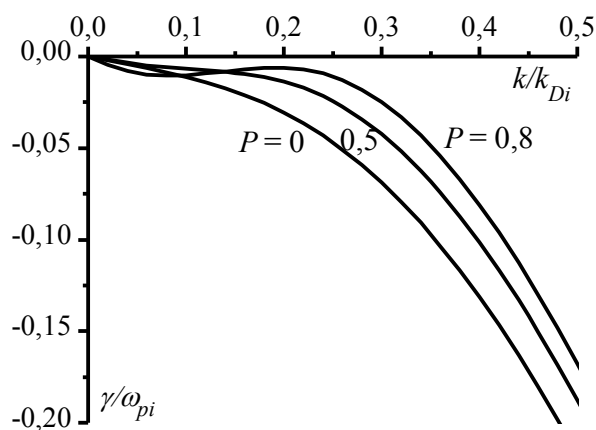


Рис. 2. Залежність декременту згасання іонно-звукових хвиль від хвильового вектора у плазмі при $T_i/T_e = 0,1$ і $P = 0; 0,5; 0,8$.

дисперсійних кривих, а саме збільшення власної частоти. Наприклад, при $P = 0,8$ (електронів у п'ять разів менше ніж іонів) і $k/k_{Di} = 0,1$ власна частота збільшується майже на 70%.

Декремент згасання іонно-звукових хвиль у водневій плазмі без порошу ($P = 0$) з $T_i/T_e = 0,1$ монотонно зростає з хвильовим вектором (див. рис. 2). Згасання спричинене тим, що зі збільшенням k зменшується фазова швидкість хвилі $v_{ph} = \omega/k$ наближаючись до теплової швидкості іонів (див. рис. 3), тобто все більше іонів резонансно взаємодіють з полем хвилі. Згасання на електронах є малим, адже їх тепла швидкість $v_{Te} = v_{Ti} \sqrt{(m_i/m_e)(T_i/T_e)} \approx 135v_{Ti}$ набагато більша за фазову швидкість хвилі і резонансна взаємодія є незначною. Фазова швидкість при $P = 0,5$ більша ніж при $P = 0$, це

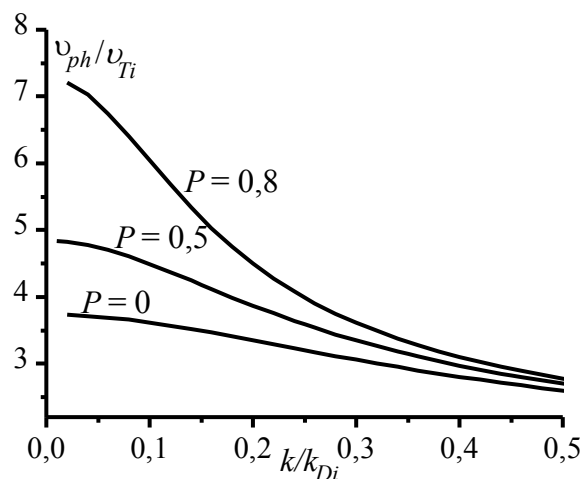


Рис. 3. Фазова швидкість іонно-звукових хвиль від хвильового вектора при $T_i/T_e = 0,1$ і $P = 0; 0,5; 0,8$.

очевидно, повинно призвести до зменшення згасання на іонах, що і спостерігається на рис. 2. Подальше зменшення концентрації електронів ($P = 0,8$) ще підвищує фазову швидкість хвилі, але вплив на декремент згасання тепер не є однозначним, а саме при $k/k_{Di} \geq 0,2$ згасання є меншим порівняно з випадками $P = 0$ та $P = 0,5$, а при $k/k_{Di} \leq 0,2$ навпаки більшим. Очевидно, що в цій області значень хвильового вектора зростання фазової швидкості є настільки високим, що починає відігравати роль згасання на електронах. Загалом, вплив зменшення концентрації електронів на декремент згасання іонно-звукових хвиль є суттєвим, наприклад при $k/k_{Di} = 0,2$ його значення відрізняється майже у 5 разів для $P = 0$ та $P = 0,8$.

Порівняємо наведені вище результати обчислень з числовим розв'язком дисперсійного рівняння (4) з діелектричною проникністю, яка отримана на основі лінійного розв'язку кінетичного рівняння яке враховує самоузгоджене зарядження порошинок та з інтегралом зіткнень, що описує поглинання електронів та іонів порошиною [6,7]. Дисперсійні криві іонно-звукових хвиль у запорошеній плазмі, обчислені з урахуванням самоузгодженого зарядження порошинок кількісно співпадають з рис. 1, отже зміна дисперсії цих хвиль спричинена саме зменшенням концентрації електронів по відношенню до концентрації іонів.

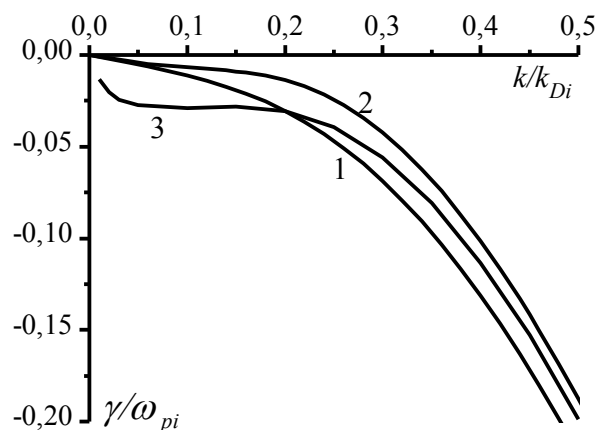


Рис. 4. Залежність декременту згасання іонно-звукових хвиль від хвильового вектора у плазмі при $T_i/T_e = 0,1$: 1 – плазма без порошу ($P = 0$), 2 – результат обчислень по формулі (5) для запорошеної плазми з $P = 0,5$, 3 – результати обчислення з урахуванням самоузгодженого зарядження порошинок з радіусом $a = 0,1k_{Di}$, $P = 0,5$ [4,5].

Порівняння декрементів згасання наведено на рис. 4. Видно, що врахування процесів самоузгодженого заряджання призводить до різкого збільшення згасання в області $k/k_{Di} \leq 0,2$, це може бути пояснено появою резонансів пов'язаних з динамікою заряджання [9]. Частота заряджання порошинки рівна [6]

$$\nu = \omega_{pi} \frac{ak_{Di}}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{T_i}{T_e} + z + 1 \right), \quad (7)$$

де a – радіус порошинки, $z = qe_e/aT_e$ – її безрозмірний заряд, який визначається з рівняння

$$e^{-z} \sqrt{\frac{T_i m_i}{T_e m_e}} = \left(\frac{T_i}{T_e} + z \right) \frac{n_i}{n_e}. \quad (8)$$

Вирази (7), (8) отримані в рамках моделі обмежених орбіт. Значення частоти заряджання (7) нормованої на плазмову іонну частоту $2\pi\nu/\omega_{pi} \approx 0,64$ ($a = 0,1k_{Di}$, $P = 0,5$, $T_i/T_e = 0,1$). З дисперсійної залежності (рис. 1) знаходимо значення хвильового вектора, що відповідає цій частоті $k/k_{Di} \approx 0,15$. Отже при $k/k_{Di} \leq 0,15$ процеси самоузгодженого заряджання порошинок повинні давати помітний додатковий

вклад у згасання іонно-звукових хвиль (реакцію плазми на електричне поле), а при $k/k_{Di} \geq 0,15$ на перший план виходять ефекти пов'язані зі збільшенням фазової швидкості, що і спостерігається на рис. 4.

Так як частота пропорційна добутку ak_{Di} , то зі зменшенням радіусу порошинок ефекти дисипації пов'язані з динамікою заряджання будуть проявлятися для менших значень частоти (хвильового вектора) хвилі. Цей висновок також підтверджується результатами обчислень.

Таким чином, встановлено, зміна дисперсії іонно-звукових хвиль у запорошеній плазмі, а саме зростання власної частоти, головним чином пов'язана зі зменшенням концентрації електронів по відношенню до іонів. Зростання частоти призводить до збільшення фазової швидкості хвилі і як наслідок зменшення згасання Ландау на іонах. Зростання фазової швидкості також може призвести до збільшення згасання на електронах. Якщо частота іонно-звукової хвилі порядку або менше частоти заряджання то з'являється додаткове згасання пов'язане з реакцією заряду порошинки на поле хвилі.

Список використаних джерел

1. Shukla P.K. Dust ion-acoustic wave / P.K. Shukla P.K., V.P. Silin // Phys. Scr. – 1992. – Vol.45, №5. – P.508.
2. Varma R.K. Electrostatic oscillations in the presence of grain-charge perturbations in dusty plasmas / R.K. Varma, P.K. Shukla, V. Krishan // Phys. Rev. E. – 1993. – Vol.47, №5. – P.3612-3616.
3. Barkan A. Experiments on ion-acoustic waves in dusty plasmas / A. Barkan, N. D'Angelo, R.L. Merlino // Planet. Space Sci. – 1996. – Vol.44, №3. – P.239-242.
4. Asaduzzaman M. Effects of nonthermal ions and polarization force on dust-acoustic waves in a density-varying dusty plasma / A. Asaduzzaman, A.A. Mamun // Phys. Rev. E. – 2012. – Vol.86, №1. – 016409.
5. Dai J.W. Dust ion acoustic instability with q-distribution in nonextensive statistics // J.W. Dai, X.C. Chen, X.Q. Li Astrophys. Space Sci. – 2013. Vol.346, №1. – P.183-190.
6. Sitenko A.G. Statistical properties and relaxation of dusty plasmas // A.G. Sitenko, A.G. Zagorodny, Yu.N. Chutov. P Schram, V.N. Tsytovich // Plasma Phys. Control. Fusion. – 1996. – Vol.38. – P.A105-A120.
7. Momot A.I. Kinetic theory of ion-acoustic waves in dusty plasmas with grains of different sizes / A.I. Momot, A.G. Zagorodny // Phys. Scripta – 2005. – Vol.71, №5. – P.543-547.
8. Sitenko A.G. Principles of the plasma theory // A.G. Sitenko, V.M. Malnev. – Kyiv: Naukova Dumka, 1994. – 372 p. (in Ukrainian).
9. Tsytovich V.N. Charging processes, dispersion properties and anomalous transport in dusty plasma/ V.N. Tsytovich, O. Havnes // Comm. Plasma Phys. Controll. Fusion. – 1993. – Vol.15, №5. – P.267-280.

Надійшла до редколегії 27.06.13

УДК 539

Овсієнко І. В., к.ф.-м.н.

**Електро-транспортні властивості
отриманого хімічним методом
нанографіту**

В даній роботі наведено результати експериментальних досліджень температурної та польової залежностей електро- та магнітоопору наногграфіту, отриманого хімічним методом з терморозширеного графіту. Показано, що характер температурної залежності електроопору в наногграфіті визначається переважним розсіюванням носіїв заряду на межах кристалітів. В області низьких температур, на відміну від вихідного ТРГ, в електро- та магнітоопорі наногграфіту має місце прояв квантових ефектів слабкої локалізації та взаємодії носіїв заряду.

Ключові слова: *наногграфіт, терморозширений графіт, електроопір, магнітоопір, слабка локалізація*

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: ovsienko@univ.kiev.ua

I. V. Ovsienko, PhD

**Electro-transport properties of obtained by
chemical method nanographite**

This paper presents the experimental researches results of electrical and magnetic resistance temperature and field dependences for nanographite obtained by chemical methods from thermoexfoliated graphite. It is shown that the character of resistance temperature dependence is determined by prevail scattering of charge carriers on the crystallites boundaries. At the low temperatures in contrast to initial thermoexfoliated graphite quantum effects of weak localization and interaction in resistance and magnetoresistance appear.

Key Words: *nanographite, thermoexfoliated graphite, electrical resistance, magnetoresistance, weak localization*

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: ovsienko@univ.kiev.ua

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

Одним з перспективних матеріалів, що може бути використаний в якості наповнювача полімерних композицій, є наногграфіт [1]. Наногграфіт має структуру, близьку до структури високо орієнтованого графіту, при цьому розміри його частинок не перевищують декількох десятків нанометрів. Частинки наногграфіту характеризуються високою структурною анізотропією, що є характерним для високо орієнтованого графіту. Наногграфіт може бути отриманий різними методами. Частинки наногграфіту утворюються як супутній матеріал в процесі отримання вуглецевих нанотрубок або фулеренів. Наногграфіт можна отримати шляхом ультразвукового диспергування терморозширеного графіту [2,3]. В представленій роботі для отримання наногграфіту використовувався метод хімічної обробки терморозширеного графіту сильними окислювачами, такими, як розчин перманганату калію в сірчаній кислоті та суміш азотної та сірчаной кислот [4,5].

Метою даної роботи було дослідження електро-транспортних властивостей отриманого хімічним методом з терморозширеного графіту наногграфіту.

Методика проведення експерименту та характеристика зразків

В якості вихідного для отримання наногграфіту використовувався терморозширений графіт (ТРГ), виготовлений шляхом термо-хімічної обробки [4] природного дисперсного графіту марки ГАК1 завальєвського родовища. Наногграфіт виготовлявся з ТРГ при обробці його 1.5М розчином перманганату калію в сірчаній кислоті (зразок 1) та сумішшю сірчаной (98%) та азотної (65%) кислот в співвідношенні 1:3 з кип'ятінням (зразок 2) та без кип'ятіння (зразок 3). Детально методи отримання та структура зразків наногграфіту описані в [4,5].

Для вимірювання кінетичних властивостей з порошків наногграфіту були отримані об'ємні зразки методом холодного пресування без

зв'язуючого. Розмір зразків складав 15мм×3мм×1мм. Вимірювання електроопору проводилося чотирьохзондовим методом на постійному струмі в інтервалі температур (4.2-293)К. Магнітоопір зразків вимірювався при температурах 77 К та 293 К в магнітному полі до 1.3Т.

Експериментальні результати та обговорення

На рис. 1 наведені температурні залежності електроопору для отриманих за різними методиками зразків графіту. Для порівняння на рис. також наведена температурна залежність питомого електроопору для вихідного ТРГ.

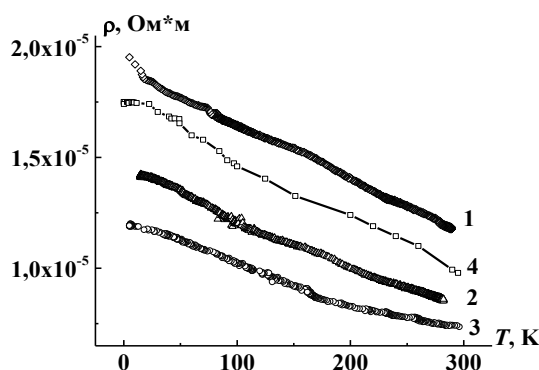


Рис. 1. Залежності $\rho(T)$ для зразків графіту (номер кривої відповідає номеру метода отримання в тексті) та для вихідного ТРГ (4)

Як видно з рисунку, значення питомого електроопору для зразка 1 дещо вище значень електроопору для вихідного ТРГ, для зразків 2 та 3 значення питомого електроопору є дещо меншими. Для всіх зразків спостерігається спадаюча залежність питомого електроопору. Відношення $\rho_{4.2}/\rho_{293}$ для зразка 1 складає 1.55, для зразків 2 та 3 – 1.59 та 1.63 відповідно, що є дещо меншим, ніж для вихідного ТРГ (1.77).

Як відомо, графіт відноситься до напівметалів, тобто речовин, які мають невелике перекриття валентної зони та зони провідності. Концентрація вільних носіїв заряду в графіті відносно мала, але при цьому носії заряду мають досить велику рухливість. Для моно-кристалічного графіту концентрація дірок та електронів є рівною. В ТРГ концентрація дірок дещо перевищує концентрацію електронів за рахунок неповного видалення інтеркалянту в процесі терморозширення.

Для провідників, що мають носії заряду двох типів, електропровідність σ визначається як:

$$\sigma = (e \cdot n \cdot \mu_n + e \cdot p \cdot \mu_p), \quad (1)$$

де n, p – концентрації електронів та дірок, а μ_n та μ_p – відповідно їх рухливості.

Температурна залежність провідності визначається температурними залежностями концентрації носіїв заряду та їх рухливостей. Для графіту концентрація носіїв заряду в діапазоні температур (4.2-77)К практично не змінюється, а при зростанні температури вище 77К починає дещо зростати. Рухливість носіїв заряду пропорційна середній довжині вільного пробігу при різних механізмах розсіювання носіїв заряду. В наближенні незалежності різних механізмів розсіювання носіїв заряду обернена величина ефективної довжини вільного пробігу носіїв заряду L_{ef} визначається як:

$$\frac{1}{L_{ef}} = \frac{1}{L_b} + \frac{1}{L_{ph}} + \frac{1}{L_{pur}} + \frac{1}{L_d}, \quad (2)$$

де $L_{ph}, L_b, L_{pur}, L_d$ – довжини вільного пробігу при розсіюванні носіїв заряду на фононах (L_{ph}), межах кристалітів (L_b), домішках (L_{pur}) і дефектах (L_d). Параметри L_b, L_{pur}, L_d є температурно незалежними і для ТРГ складають: $L_{pur}, L_d \sim 6 \cdot 10^{-8}$ м, $L_b \sim 3 \cdot 10^{-8}$ м, в той час як L_{ph} оцінюється як $\sim 10^{-7}$ м. Таким чином, згідно з (2), ефективна довжина вільного пробігу для ТРГ визначається, в основному, температуро-незалежною величиною довжини вільного пробігу L_b . При зростанні температури вище 77К значення L_{ef} слабо залежить від температури, концентрація носіїв заряду зростає, що приводить до зменшення величини питомого електроопору. При зниженні температури менше 77К, тобто, в тому інтервалі, де концентрація носіїв заряду практично не залежить від температури, питомий електроопір також не повинен залежати від температури, що й спостерігається експериментально.

В рамках моделі електропровідності матеріалів, що мають два типи носіїв заряду, з врахуванням переважного розсіювання носіїв заряду на границях кристалітів вираз для питомого опору матеріалу може бути поданий у вигляді:

$$\rho = \frac{\left(\frac{n}{m_n^* v_n} + \frac{p}{m_p^* v_p} \right)^{-1}}{e^2} \cdot \frac{1}{L_b}, \quad (3)$$

де $m_{n,p}^*$ та $v_{n,p}$ відповідно ефективні маси та швидкості на поверхні Фермі електронів та дірок.

Як впливає з рисунку 1, в області температур >77 К для отриманих зразків графіту температурна залежність електроопору є близькою до температурної залежності електроопору в ТРГ. При низьких

температурах, на відміну від вихідного ТРГ, в наногرافіті спостерігається аномальне зростання величини питомого електроопору, що особливо яскраво виражено для зразка нанографіту 1.

Відомо, що для дрібнокристалічних графітів спостерігається аномальна температурна залежність електроопору в області низьких температур, яка може бути пояснена в рамках теорії квантових ефектів слабкої локалізації та електрон-електронної взаємодії носіїв заряду. Вказані ефекти проявляються в системах з слабким впорядкуванням. Згідно з цією теорією [6] поправку до провідності $\Delta\sigma$ за рахунок дії вищевказаних квантових ефектів в двовимірному випадку можна подати як $\Delta\sigma \sim \ln T$.

На рис. 2 наведена залежність $\Delta\sigma = f(\ln T)$, де $\Delta\sigma(T) = \sigma_{\text{експ}}(T) - \sigma_p(T)$, $\sigma_p(T)$ - електропровідність зразка, яка була розрахована в рамках наближення, що в даному інтервалі температур провідність не залежить від температури.

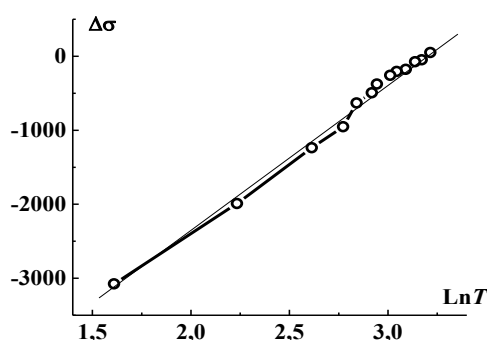


Рис. 2. Залежність $\Delta\sigma = f(\ln T)$ для зразка 1.

Як впливає з рисунку, спостерігається лінійна залежність $\Delta\sigma = f(\ln T)$, що свідчить про можливість реалізації для отриманих нанографітів квантових ефектів слабкої локалізації та електрон електронної взаємодії та про двовимірний характер провідності в них.

На рис. 3 наведені залежності магнітоопору отриманого нанографіту (зразок 1) від величини магнітного поля при двох температурах: 77К та 293К, для порівняння на рис. 4 наведені такі ж залежності магнітоопору для вихідного ТРГ. Як видно з рисунку 4, для ТРГ при зменшенні температури величина магнітоопору зростає, що є характерним для графітів з високим ступенем структурної досконалості.

Залежність магнітоопору графітових матеріалів з двома типами носіїв заряду від величини магнітної індукції B може бути подана, як:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{p}{n} \cdot \mu_n \mu_p B^2, \quad (4)$$

тобто, відносний магнітоопір залежить квадратично від величини магнітної індукції B .

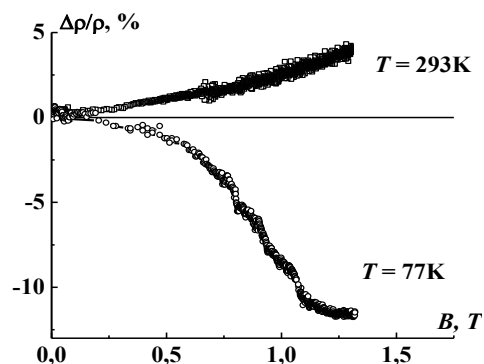


Рис. 3. Залежність $\Delta\rho/\rho(B)$ для зразка 1

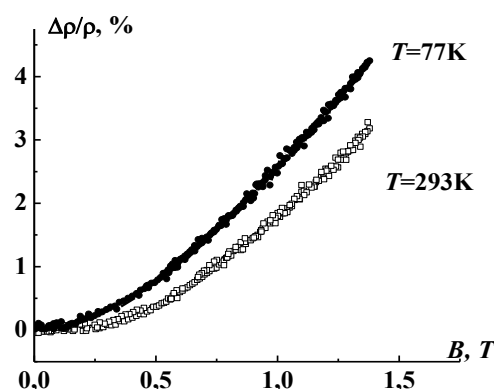


Рис. 4. Залежність $\Delta\rho/\rho(B)$ для зразка ТРГ

На рис. 5 наведена залежність магнітоопору від квадрату магнітної індукції для зразка ТРГ при кімнатній температурі.

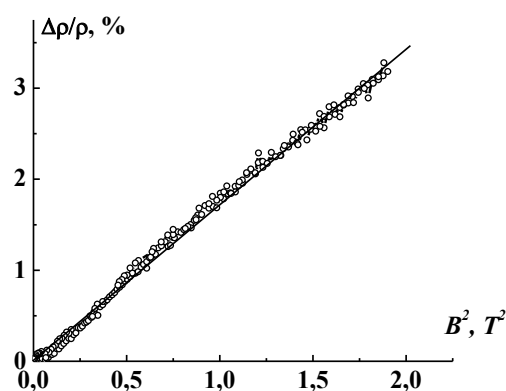


Рис. 5. Залежність $\Delta\rho/\rho(B^2)$ для зразка ТРГ, $T = 293\text{K}$

Як впливає з рисунку, дійсно спостерігається лінійна залежність відносного магнітоопору від квадрату магнітної індукції. Вважаючи, що рухливості електронів і дірок є приблизно однаковими, а відношення p/n

дорівнює 1.2, оцінимо за формулою (4) усереднене значення рухливості. Визначене з експериментальних даних усереднене значення рухливості для ТРГ складає $0.25 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$.

Інший характер залежності магнітоопору від температури спостерігається для зразка графіту #1. При кімнатній температурі залежність є квадратичною (рис. 6, вставка), сама величина магнітоопору є меншою в порівнянні з ТРГ, що пов'язано із зменшення величини рухливості носіїв заряду в графіті за рахунок незначного зменшення розмірів кристалітів. Проте при температурі 77К спостерігається від'ємний магнітоопір, тобто, зменшення електроопору в присутності магнітного поля. Це явище не можна пояснити в рамках класичної теорії.

Як було показано при аналізі електроопору, в області низьких температур для отриманого графіту проявляються квантові ефекти слабкої локалізації та електрон-електронної взаємодії. В рамках теорії слабкої локалізації та електрон-електронної взаємодії загальний магнітоопір можна записати як:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\Delta R}{R} = \frac{R(B) - R(0)}{R(0)} = \left(\frac{\Delta\rho}{\rho} \right)_{\text{кл}} + \left(\frac{\Delta\rho}{\rho} \right)_{\text{д}}, \quad (5)$$

де $R(0)$ – електроопір у відсутності магнітного поля, $R(B)$ – електроопір у магнітному полі напруженістю B . Додаток до магнітоопору, пов'язана з квантовими ефектами слабкої локалізації, для двовимірних систем у випадку слабких полів $\sim B^2$, у випадку сильних полів $\sim \ln B$.

На рис. 6 наведена залежність магнітоопору від B^2 при температурі 77К.

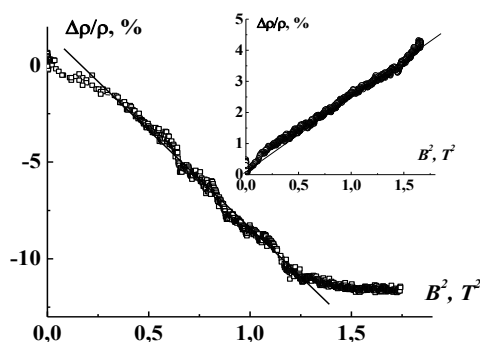


Рис. 6. Залежності $\Delta\rho/\rho=f(B^2)$ для графіту (зразок 1), $T = 77 \text{ K}$ та $T = 293 \text{ K}$ (вставка)

Як видно з рисунку, при магнітному полі до 1.2Т спостерігається лінійна залежність від'ємного магнітоопору від квадрата індукції магнітного поля, що є характерним для прояву ефекту слабкої локалізації носіїв заряду в слабких магнітних полях. При зростанні

магнітного поля вище 1.2Т характер залежності відносного опору від магнітного поля змінюється на логарифмічний. Оцінене з експериментальних даних польової залежності магнітоопору значення усередненої рухливості носіїв заряду складає $0.14 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$. Це значення усередненої рухливості майже в два рази менше, ніж розраховане значення усередненої рухливості для вихідного ТРГ. Таке зменшення рухливості носіїв заряду, як і прояв в кінетичних властивостях графіту квантових ефектів слабкої локалізації, вказують на зменшення розмірів кристалітів та зростання дефектності структури графіту в процесі обробки його сильними окислювачами.

Висновки

Проведені експериментальні дослідження електро- та магнітоопору виявили, що для отриманих хімічним методом з ТРГ графітів характер температурної залежності електроопору визначається переважним розсіюванням носіїв заряду на межах кристалітів, що є характерним і для вихідного ТРГ. В області низьких температур, на відміну від вихідного ТРГ, в електро- та магнітоопорі має місце прояв квантових ефектів слабкої локалізації та взаємодії носіїв заряду.

Список використаних джерел

1. Ziatdinov A.M. Nanographenes and nanographites: synthesize, structure and electronic properties // Visn. FED RAS. – 2006. - №5. – P.57-64. (in Russian).
2. Iony Yu.V., Tkachev S.V., Byluchev N.A., Gubin S.P. Obtaining of ultradisersion graphite // Inorganic materials. –2011. - 47. -№6. – P.671-677. (in Russian).
3. Vovchenko L, Perets Yu., Ovsienko I., Matzui L., Oliynyk V., Launetz V. Shielding coatings based on carbon-polymer composites // Surface & Coatings Technology.-2012. - 211. –P.196-199.
4. Perets Yu.S., Ovsienko I.V., Vovchenko L.L.,Matzui L.Yu., Brusilovetz O.A., Pundyk I.P. Characterization of nanodispersed graphite // Ukr. J. Phys. - 2012. – 57. – N2. –P.219-223.
5. Ovsienko I.V., Perets Yu.S., Vovchenko L.L., Kozachenko V.V., Matzui L.Yu. Microstructure of functionalized TEG // Visn., Ser. Fiz.-Mat. Nauky, Kyiv Univ. im. Tarasa Shevchenka.– 2012.-№1.– С. 345- 352. (in Ukrainian).
6. Altshuler B.L., Aronov A.G. To theory of disordered metals in the heavily doped semiconductors // JETPh. – 1979. – 77, №11. – P.2028-2044. (in Russian).

Надійшла до редколегії 24.04.13

УДК 621.762

Попов¹ О.Ю., к.ф.-м.н., доц.,
Клепко² О.Ю., асп.,
Суляліна О.Д., студ.

Реакційний синтез композиційного матеріалу на основі TiB_2

Методом гарячого реакційного пресування отримано керамічний композиційний матеріал системи $TiB_2-Al_2O_3$. Кількість дибориду титану змінювалась від 16% до 66%. Встановлено, що додавання зерен TiB_2 до суміші порошків $Ti-Al-B_2O_3$ дозволяє синтезувати керамічний матеріал при температурі ізотермічної витримки $1400^\circ C$ і тиску 20 МПа протягом 4 хв. Нагрівання шихти вище температури крихко-пластичного переходу Al_2O_3 ($1600^\circ C$) дозволяє майже повністю ущільнити композит за рахунок пластичної течії зерен оксиду алюмінію.

Ключові слова: реакційне гаряче пресування, кераміка, композит, диборид титана

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03187, м. Київ, пр-т. Глушкова 4, e-mail: ¹alexey.popov1861@gmail.com

²klepko21@i.ua

O.Yu. Popov¹, PhD,
O.Yu. Klepko², PhD stud.,
O.D. Sulyalina, stud.

Reaction synthesis of TiB_2 -based composite material.

TiB_2 based ceramic composite obtained reaction hot pressing of $Ti-Al-B_2O_3-TiB_2$ powder mixture. Quantity of initial TiB_2 grains varied from 16% to 66%. TiB_2 grains addition to $Ti-Al-B_2O_3$ powders allows synthesizing a dense ceramic at a $1400^\circ C$ temperature, under 20MPa pressure for 4 minutes. The heating to the temperature above the brittle-plastic transition Al_2O_3 ($1600^\circ C$) almost completely compact the composite (over 97%) due to plastic flow of grains of aluminum oxide.

Key Words: reactive hot pressing, ceramics, composite, titanium diboride

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03187, Kyiv, Glushkova st., 4, e-mail: ¹alexey.popov1861@gmail.com

²klepko21@i.ua

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

На сьогоднішній день існує гостра необхідність в розробці та виробництві надміцних матеріалів. Таким вимогам відповідають технічні та інструментальні кераміки. В сучасному матеріалознавстві серед керамік особливо цікавими є бориди, зокрема борид титана. Матеріали на його основі мають високі фізико-механічні характеристики, які дозволяють використовувати їх для виготовлення ріжучого інструмента [1], зносостійких деталей, пластин для бронежилетів, різців для свердел та бурових установок. Однак синтез керамік потребує високих температур, що призводить до значних енергетичних та фінансових витрат. Тривала витримка при таких температурах спричиняє збільшення розміру зерен [2] внаслідок рекристалізаційних процесів і, відповідно, зниження механічних характеристик.

Тому важливою є задача пониження температури та скорочення часу синтезу керамічних фаз.

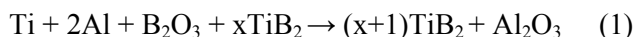
Одним із способів зниження температури синтезу компактних тугоплавких матеріалів є реакційне гаряче пресування [3], суть якого полягає в тому, що складові фази композиту формуються в процесі виготовлення матеріалу за рахунок перебігу хімічних реакцій між вихідними компонентами порошкових сумішей.

Метою представленої роботи стало дослідження можливості отримання композиційного матеріалу на основі дибориду титана методом реакційного гарячого пресування шихти та залежності структури синтезованих керамічних матеріалів від умов синтезу.

Методика виготовлення і дослідження зразків

Дослідні зразки були отримані методом гарячого пресування суміші порошків титана, дибориду титана, алюмінію та оксиду бора з

середнім розміром зерна 50мкм на установці з резистивним нагрівом. Склад зразків визначався за рівнянням реакції:



Дрібнодисперсну суміш порошків розміщували в графітовій трубці між пунсонами установки для гарячого пресування, прикладали тиск (20 – 30 МПа) і нагрівали із швидкістю 80°C/хв. до температури ізотермічної витримки (1400 – 1600°C).

Виготовлені зразки мали циліндричну форму діаметром 10мм і висотою 5мм. Зразки шліфувались і полірувались за допомогою алмазних паст різної дисперсності. Фазовий склад отриманих матеріалів вивчали методом рентгенівського фазового аналізу на автоматизованому дифрактометрі ДРОН-3. Структуру досліджували за допомогою растрової електронної мікроскопії. Густина зразків вимірювали методом гідростатичного зважування. Мікротвердість за Віккерсом

вимірювали методом індентування на приладі ПМТ-3. Навантаження на індентор складало 4 Н.

Режими синтезу та густина матеріалів

Авторами [4] показано, що реакція між титаном, алюмінієм та оксидом бора повністю завершується при температурі 1400°C протягом 1 хв. Однак утворення великої кількості рідкої фази під час нагрівання шихти вимагало прикладання тиску лише після двохвилинної витримки при температурі 1000°C, коли кількість твердої фази досягає ~ 40% [5]. Складність визначення моменту прикладання тиску іноді призводила до витікання розплавів Al та B₂O₃. Для вирішення цієї проблеми до складу шихти додали TiB₂ в якості нереагуючого компонента, що дало можливість прикладати тиск перед підняттям температури.

Таким чином була виготовлена серія зразків складу Ti-TiB₂-Al-B₂O₃. Вміст TiB₂ змінювався від 16 до 66%^{мас}. Температура синтезу становила 1400°C, час ізотермічної витримки – 4 хв. Параметри виготовлення зразків та їх густина вказані в таблиці 1.

Таблиця 1.

Параметри виготовлення зразків першої серії та їх густина

№ зразка	TiB ₂ , моль	TiB ₂ , масових відсотків	Тиск, МПа	Час ізотермічної витримки, хв.	T, °C	Теоретична густина, г/см ³	Густина, г/см ³	Відносна густина, %
1.1	4	66	20	4	1400	4,37	3,29	75
1.2	3	54	20	4	1400	4,35	3,31	76
1.3	2	44	20	4	1400	4,31	3,51	81
1.4	1,25	33	20	4	1400	4,28	3,53	82
1.5	1	26	20	4	1400	4,26	3,87	91
1.6	0,75	23	20	4	1400	4,24	3,6	85
1.7	0,5	16	20	4	1400	4,22	3,64	86

При виготовленні дослідних зразків з вмістом дибориду титана 16 та 23% спостерігалось витікання рідкої фази під час прикладання тиску. Починаючи з 26%TiB₂ об'єму твердої фази стає достатньо для запобігання цьому процесу. Слід зазначити, що саме така кількість дибориду титана у шихті дозволяє отримати найбільшу відносну густина матеріала. При подальшому збільшенні вмісту TiB₂ процес ущільнення ускладнюється і значення відносної густини зразків знижується. Обрахунки середньої густини продуктів реакції та вихідних

компонентів показали, що взаємодія між порошками шихти відбувається з яскраво вираженим дилатометричним ефектом. Зменшення об'єму при цьому становить ~ 30%. Таким чином, навіть при повному зникненні пор після прикладання тиску до суміші, подальший перебіг реакції призведе до формування нових порожнин. Збільшення тиску могло посприяти подальшому ущільненню. Однак, після підняття тиску до 30МПа під час гарячого пресування спостерігалось витікання рідкої фази. Очевидно, для такого тиску вміст твердої фази є

недостатнім. Тому кількість дибориду титана в вказані параметри виготовлення зразків та їх початковій шихті збільшили до 37%. В таблиці 2 густини.

Таблиця 2.

Параметри виготовлення зразків другої серії та їх густина

№ зразка	Температура, °C	Час ізотермічної витримки, хв	Тиск, МПа	Теоретична густина, г/см ³	Густина, г/см ³	Відносна густина, %
2.1	1400	8	30	4,29	3,49	81
2.2	1500	8	30	4,29	3,62	84
2.3	1600	8	30	4,29	4,22	98
2.4	1800	8	30	4,29	4,15	97
2.5	1900	8	30	4,29	4,27	99

З результатів, представлених в таблиці 2, видно, що самого лише підняття тиску не достатньо для інтенсифікації процесів ущільнення. Підвищення температури синтезу до температури в'язко-пружного переходу для Al_2O_3 (1600°C) та TiB_2 (1900°C) дозволило зменшити поруватість до 1 – 2% завдяки пластичному деформуванню синтезованих тугоплавких зерен. Таким чином можна вважати, що усадка матеріалу відбувається в дві стадії: спочатку в присутності рідкої фази, а потім завдяки пластичній текучості зерен тугоплавких фаз.

Фазовий склад та структура отриманих матеріалів

Рентгенівський фазовий аналіз показав наявність в зразках фаз дибориду титана та оксиду алюмінію. Елементний аналіз отриманих шліфів (рис. 1, 2) підтвердив результати рентгену, але виявив присутність у зразках цирконію, який містився в порошку дибориду титана в якості домішки.

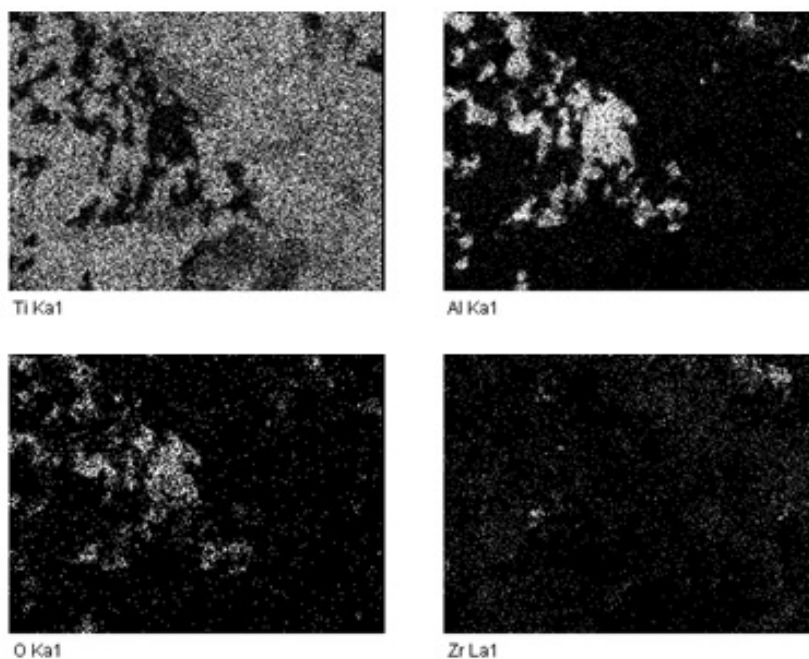


Рис. 1. Розподіл елементів по поверхні зразку 1.5

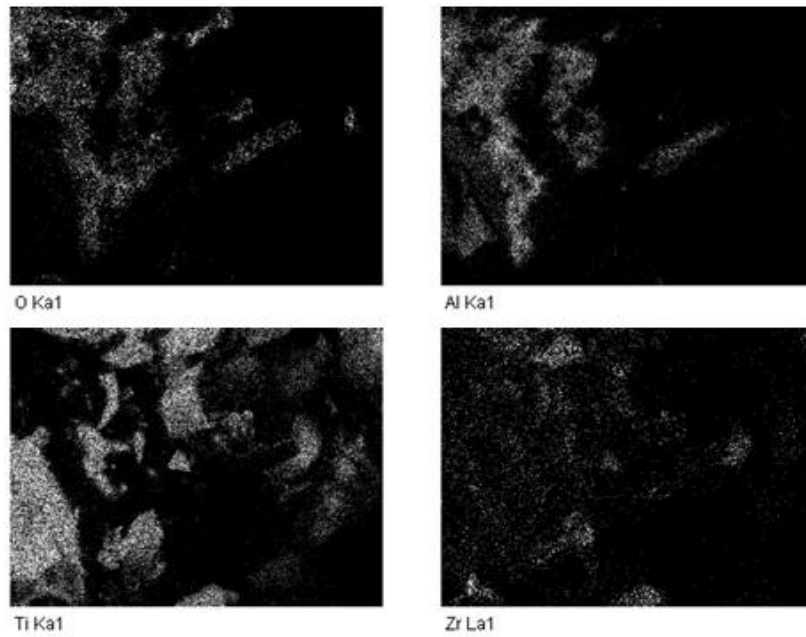


Рис. 2. Розподіл елементів по поверхні зразка 2.5

Результати електронної мікроскопії зразків, виготовлених під тиском 20 МПа, показали, що на мікрорівні матеріал являє собою суміш зерен TiB_2 та Al_2O_3 більш-менш рівномірно розподілених по об'єму, середні розміри яких становлять 3 – 5 мкм.

Проте на мікрофотографії (див. рис. 3) видно, що деяка частина зерен має субмікронні розміри. Така структура може формуватись внаслідок виникнення зародків оксиду алюмінію та дибориду титана під час утворення відповідних фаз з реакційної суміші $Ti-Al-B_2O_3$.

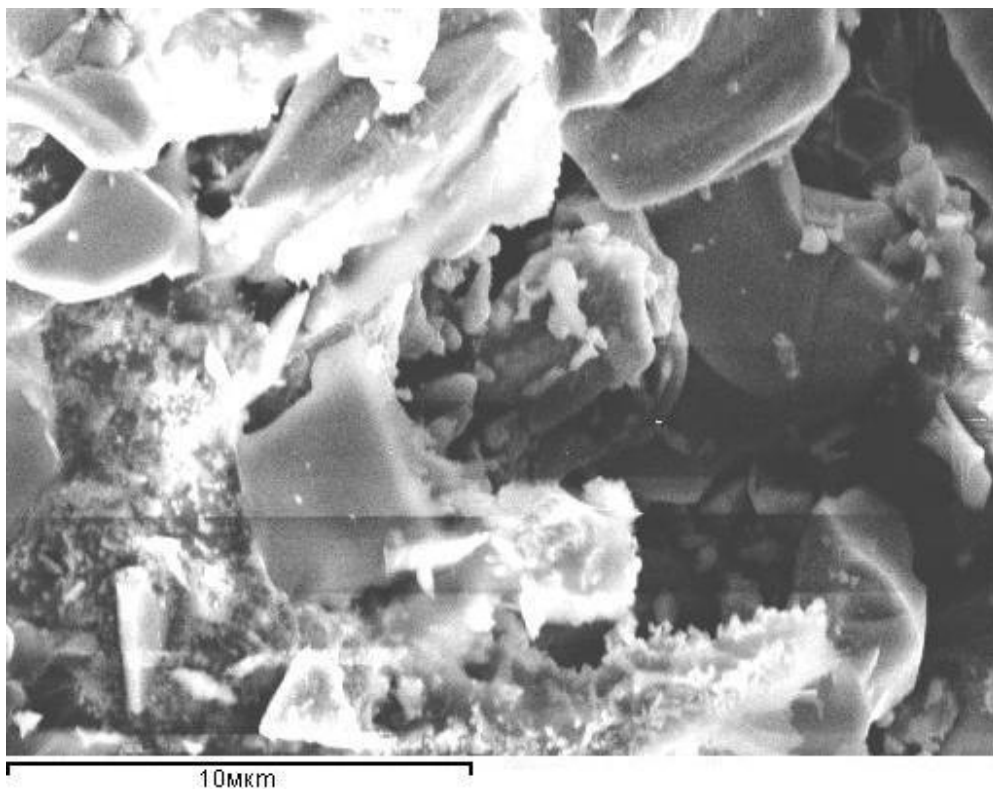


Рис. 3. Фрактограма зразка 1.5

Наявність великих зерен (близько 10 мкм.) дибориду титана пояснюється їх присутністю в початковій шихті.

Формування настільки дрібнодисперсної структури з досить крупних порошків шихти стало можливим завдяки синтезу кінцевих фаз в процесі гарячого пресування зразка. Завдяки цьому відпадає необхідність в попередньому подрібненні порошків, а наявність проміжної рідкої фази робить непотрібним тривале перемішування компонентів шихти.

Підвищення параметрів синтезу (температури до 1900°C, тиску до 30 МПа та тривалості ізотермічної витримки до 8 хвилин) призвело до суттєвого зростання розмірів синтезованих зерен – від кількох до 10-20 мкм для Al_2O_3 і від кількох до десятків мікрометрів для TiB_2 (рис. 4).

Зростання зерен оксиду алюмінію може бути пояснене тим, що температура синтезу матеріалу (1900°C) є досить близькою до температури плавлення цієї фази (2050°C), що, зрозуміло,

позначається на підвищенні швидкості рекристалізаційних процесів. З іншого боку, температура плавлення дибориду титану становить близько 3000°C, отже, при температурі 1900°C швидкість росту зерен цієї фази має бути суттєво нижчою, ніж для оксиду алюмінію. Однак, слід зазначити, що TiB_2 не тільки утворювався під час реакції, але й був присутній у початковій шихті, то відбулось наростання дрібних зерен навколо початкових крупних включень дибориду титану, що й призводило до активізації рекристалізації.

Мікротвердість зразка з найбільшою густиною, синтезованого під тиском 20 МПа, становить 10 ГПа. Відносно невисоке значення цієї механічної характеристики пояснюється тим, що реакція проходить зі зменшенням об'єму кінцевої речовини відносно початкової (біля 30-35%). Це призводить до формування порожнин, тому повне ущільнення матеріалу при такому режимі синтезу неможливе.

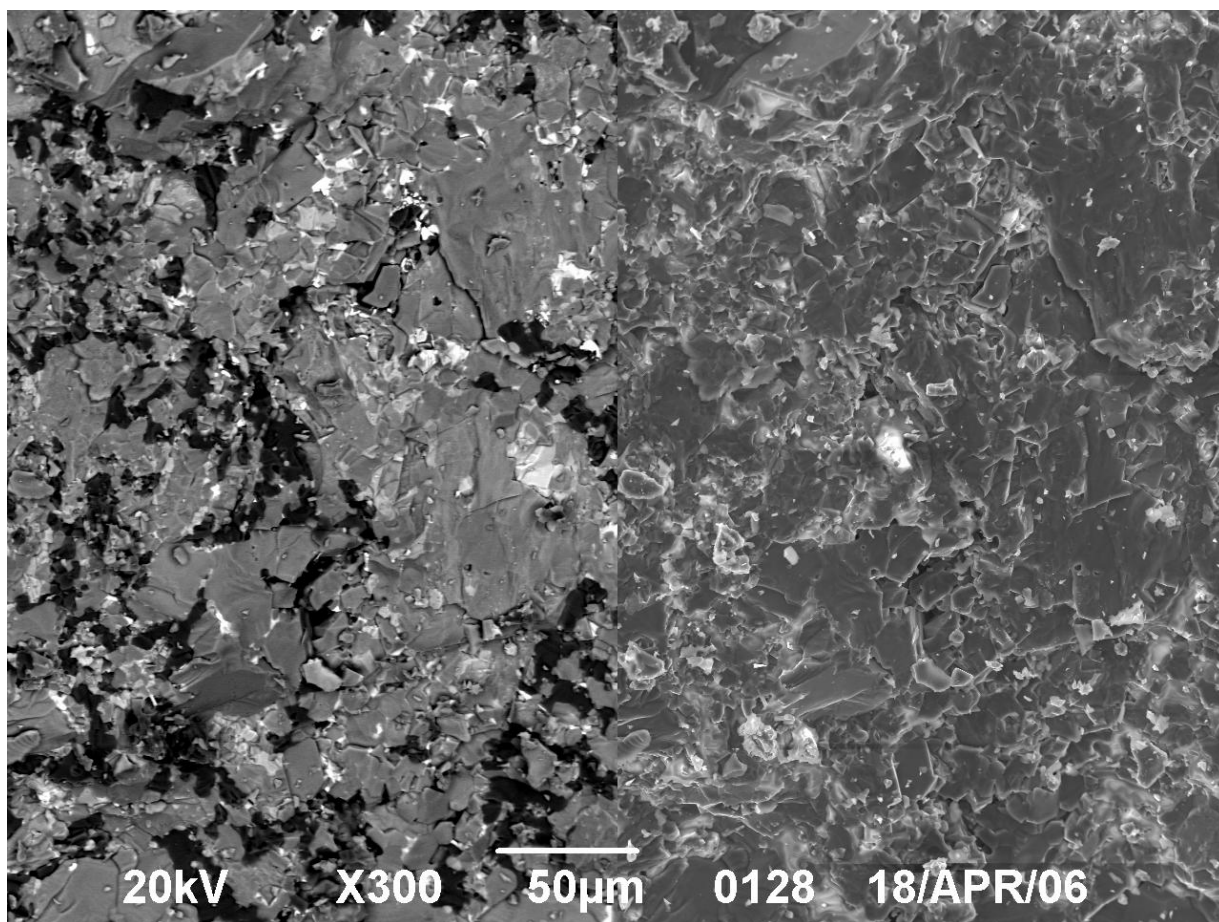


Рис. 4. Фрактограма зразка 2.5, збільшення 300

Мікротвердість зразка, синтезованого при температурі 1900°C та тиску 30 МПа становить 19 ГПа. Отже отриманий матеріал має хороші механічні характеристики і може бути перспективним у використанні.

Таким чином, на основі проведених досліджень фізико-хімічної взаємодії компонентів системи Ti-TiB₂-Al-B₂O₃ були отримані композиційні матеріали складу TiB₂ – Al₂O₃. Висока швидкість усадки при відносно низьких температурах і досягнення густини, близької до теоретичної, пояснюється наявністю в суміші рідкої фази під час гарячого пресування, а подрібнення структури – формуванням кінцевих фаз в процесі синтезу композита.

Висновки

Досліджено можливість реакційного синтезу керамічних та металокерамічних матеріалів в системі Ti-TiB₂-Al-B₂O₃. Встановлено:

1. Додавання зерен дибориду титана до суміші порошків Ti-Al-B₂O₃ дозволяє

синтезувати керамічний матеріал на основі TiB₂ при температурі 1400°C та тиску 20 МПа протягом 4 хв. Поруватість утвореного композиту становить 9%.

2. Утворення тугоплавких фаз TiB₂, Al₂O₃ в процесі гарячого пресування суміші порошків Ti-TiB₂-Al-B₂O₃ відбувається зі значним (порядку 30%) дилатометричним ефектом, що пояснює поруватість матеріалу.
3. Нагрівання шихти вище температури в'язко-пружного переходу Al₂O₃ (1600°C) дозволяє майже повністю ущільнити композит за рахунок пластичної течії зерен оксиду алюмінію.

Список використаних джерел

1. Deng Jianxin, Cao Tongkun, Liu Lili. Self-lubricating behaviors of Al₂O₃/TiB₂ ceramic tools in dry high-speed machining of hardened steel // Journal of the European Ceramic Society. – 25 (2005) P.1073 – 1079.
2. Weimin Wang, Zhengyi Fu, Hao Wang, Runzhang Yuan. Influence of hot pressing sintering temperature and time on microstructure and mechanical properties of TiB₂ ceramics // Journal of the European Ceramic Society. – 22 (2002) P. 1045 – 1049.
3. Popov O.Ju., Kazo I.F., Makara V.A., Chernobuk S.V. Structure and phase transformations during the synthesis of composite materials based on titanium and hafnium carbides and borides with microinclusions of carbon // Materials Science. – 2007. – №7. – P.54 – 56. (in Russian)
4. Popov A. Ju., Chernobuk S.V., Mysnyk A. Ju., Markiv V.Ja. Refractory compound formation in Ti-Al-B₂O₃ kinetics // Materials Science. – 2009. – №11. – P. 16 – 19. (in Russian)
5. Popov A. Ju., Klepko A. Ju., Chernobuk S.V. Structure and mechanical characteristics of Ti-B-Al-O composite materials // Materials Science. 2012. № 6. P. 20–23. (in Russian)

Надійшла до редколегії 13.09.13

УДК 519.9

Сніцєрова О.М.¹, студ.
Тєрєнт'єва Ю.Г.¹, к.ф.-м.н., доц..
Погрєбна А.В.¹, асп.
Коваль Ю.В.¹, асист.
Ящук В.М.¹, проф

Можливості люмінесцентних методик дослідження біологічних тканин для медичних застосувань

В статті представлений огляд сучасних досліджень в галузі альтернативних методик діагностики онкологічних захворювань спектроскопічними методами, як в живому організмі (*in vivo*) так і клінічно (*in vitro*). Досліджено флюоресценцію біологічних тканин, а також крові. На сьогоднішній день метод флуоресцентного аналізу не дає точної діагностики стадії захворювання, але може бути критерієм наявності онкологічного захворювання, як допоміжний метод контролю традиційних методів діагностики. Спектри випромінювання тканин, вражених онкологічними захворюваннями, демонструють загальне зниження інтенсивності випромінювання, а також відсутність деяких піків, що присутні в спектрах здорових тканин.

Ключові слова: флюоресценція, тканини, кров, онкологічні захворювання, діагностика.

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: juliaTer@i.ua

O.M. Snitserova¹, stud.
Y.G. Terent'yeva¹, PhD
A.V. Pogrebna¹, PhD stud.
Ju. V. Koval¹, ass. Prof
V. M. Yashchuk¹, Prof.,,

The perspectives of using the luminescent methods in studying biological tissues for medical application

This paper provides an overview of current research in the field of alternative methods for diagnosis of cancer by spectroscopic methods, both in vivo (in vivo) and clinical (In vitro). Investigated fluorescence of biological tissues and blood. Today, the method of fluorescence analysis does not accurately diagnose the stage of the disease, but can be a criterion of the presence of cancer, as an additional method for control conventional diagnostic methods. Emission spectrum of tissues affected by oncological disease show a general decrease in the intensity of radiation and the absence of some peaks present in the spectra of healthy tissue.

Key Words: *fluorescence, tissues, blood, cancer, diagnostics*

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: juliaTer@i.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Оптичні та спектроскопічні методи дослідження на сьогоднішній день показали себе як дуже перспективні в плані діагностики різноманітних захворювань.

Дослідження показують, що спектроскопічними методами можна отримати інформацію не лише про тканину, а й про її молекулярний склад. І таким чином розрізняти різні (напр. здорові та такі що мають патологічні зміни) тканини.

На сьогоднішній день для діагностики онкологічних захворювань використовується біопсія, цистоскопія ті інші методи. Але все ці

методи є інвазивними, тобто, нажаль, пов'язаними з хірургічним втручанням в організм пацієнта. І альтернативим є метод аналізу флюоресценції, зокрема, крові та її компонент - безпечний, безболісний і нешкідливий. Також в багатьох випадках результати біопсії бувають помилково позитивними, що призводить до необхідності повторювати доволі болючу і неприємну процедуру. На відміну від біопсії, флюоресцентні дослідження є експресними, такими, що не пошкоджують тканини. Тому вбачається перспективним подальше дослід-

ження можливостей застосування флюоресцентного методу в діагностиці.

Флюоресценція біологічних тканин

При опромінюванні досліджуваної речовини квантом світла відбувається процес поглинання фотону речовиною. При цьому атоми і молекули речовини переходять у збуджений стан. Деактивація збудження може відбуватися декількома шляхами – через хімічну реакцію, генерацію носіїв струму, фотосинтез, фотопровідність, виділення тепла, а також люмінесценцію.

Живі тканини флюоресценціюють, і, як правило, їх спектри не мають структурних піків (на відміну від атомних спектрів), хоча їх загальна форма є характерною для певного типу клітин. Тому флюоресценція може бути використана, як інструмент для діагностики та розрізнення між нормальними тканинами та тими, в яких є паталогічні зміни. На підтвердження була проведена серія досліджень як на живих організмах (*in vivo*) так і клінічно (*in vitro*) [2,3,4,5,15,8].

Процес флюоресценції забезпечується наявністю в тілі людини флюорофорів, що містяться в клітинах тканин, а саме – мітохондріях і лізосомах. Їх спектри збудження лежать в УФ та короткохвильовому діапазоні. Список флюорофорів та відповідних довжин хвиль збудження і емісії наведено в табл.1 [20,21,26].

Табл.1 Флюорофори та відповідні довжини хвиль збудження та випромінювання.

Флюорофор	Тканина			λ збудж(нм)	λ випр(нм)
	шкіра	мозок	кров		
НАДФ	х	х	х	350	460
ФАД	х	х	х	410	510-530
Еластін	х	х	х	420,460,360,425	500,540,410,490
Колаген	х	х	-	325,333,370	380,400,460
Триптофан	х	х	х	275	350
Ендогени	х	х	х	260,400	610,630,675
Ліпопіменти	х	х	-	340-395	450,600
Кератин	х	-	-	370	460
Тирозин	х	х	х	275	280-310
Феніл-аланін	х	х	х	257	282
ДНК	-	-	х	260	285-500
РНК	-	-	х	260	300-500

Лазерно-індукована флюоресценція (ЛІФ) виявилась дуже зручним методом для розрізнення тканин, уражених атеросклерозом (захворювання, внаслідок якого ущільнюються стінки судин артерій в результаті відкладання

жирової речовини на стінках) і нормальних тканин. Одні з найперших досліджень були проведені Kittrell та ін. [15] в 1985 році в клінічних умовах. Їх методика була використана і перевірена іншими групами вчених з використанням різних довжин хвиль збудження (лазерів). [22,23,4]. Як приклад, флюоресцентні дослідження в живому організмі були проведені групою під керівництвом Bartorelli [5]. Результати дозволили застосовувати флюоресценцію як допоміжний метод контролю під час проведення ангіопластичної хірургії (видалення тромбів з судин артерій за допомогою тонкого катетору, що вводиться в артерію)

Експерименти проведені групою Alfano [6] показали, що аналізуючи флюоресценцію можна відрізнити тканини грудної залози і легень, уражені раковими пухлинами, від здорових. Також, лазерно-індукована флюоресценція застосовується в стоматології – за її допомогою можна виділяти ділянки зуба, що уражені карієсом.

Група під керівництвом Andersson-Engels [7] проводила дослідження для виявлення можливості застосування флюоресценції як методу діагностики різних стадій раку в живому організмі. Для дослідження були обрано, зокрема, тканини ЛОР (вухо, горло, ніс). Для збудження флюоресценції застосовувалось світло різних довжин хвиль – 337 нм і 405 нм. В результаті було одержано, що для злоякісних тканин ротової порожнини було помічено достовірне зниження інтенсивності сигналу для ультрафіолетової області спектру і додатковий пік, який можна пояснити наявністю ендогенних порфіринів.

Лазерно-індукована флюоресценція тканин товстої кишки в умовах живого організму вивчалась декількома групами вчених. Дві перші підготовчі роботи по дослідженню можливості використовувати флюоресценцію для розрізнення нормальних тканин слизової оболонки товстої кишки від аденоматозних поліпів (вважаються поліпами, що в подальшому стануть причиною появи раку) та ракових пухлин, показали чудові перспективи для подальшого застосування флюоресценції в цій області. Karadia та співавтори [10] використали HeCd-лазер (325 нм) для збудження тканин слизової оболонки товстої кишки. За результатами цих досліджень тканини аденоматозних і гіперпластичних поліпів (доброякісні утворення) діагностуються із 100%

точністю, в той час як нормальні тканини визначаються з точністю 94%.

Також були проведені експерименти по дослідженню флюоресценції тканин сечового міхура в живому організмі [11]. Koenig та співавт. використовували в якості джерела збудження N_2 – лазер (337 нм), в якості приймача оптичний багатоканальний аналізатор (ОБА). Було зафіксовано дві основні спектральні відмінності між нормальними тканинами сечового міхура і злоякісними. По-перше – злоякісні тканини продемонстрували загальне зниження інтенсивності флюоресценції. По-друге було виявлено відсутність піку на довжині хвилі близько 385 нм. В той же час, для нормальних тканин цей пік був присутній, навіть при наявності запалення. Падіння інтенсивності випромінювання пояснюється тим, що кровопостачання в злоякісних тканинах, та тканинах де є запалення, є вищим, а це, в свою чергу, означає, що кількість гемоглобіну також збільшується. А оскільки гемоглобін поглинає флюоресцентне випромінювання – це призводить до падіння інтенсивності флюоресценції. Пік на довжині хвилі 385 нм пояснюється наявністю в здорових тканинах певних речовин, що зв'язуються з колагеном. Оскільки в уротелію (шар клітин що вистилає поверхню нирок, сечового міхура) колаген відсутній, сигнал від молекул, що зв'язані з хромофором, змінився внаслідок розсіювання. І тому відсутність в спектрах піку на довжині хвилі 385 нм може бути критерієм для діагностики злоякісних пухлин.

Anidjar та співавт. [12] визначили довжини хвиль збудження (308 нм, 337 нм та 480 нм) як такі, які дозволяють за допомогою флюоресценції відрізнити здорові тканини сечового міхура від злоякісних. При опроміненні злоякісних пухлин світлом з довжиною хвилі 337 нм і 480 нм було помічено загальне зниження інтенсивності випромінювання для пухлин, а також цим методом можна виявити новоутворення на початкових стадіях розвитку (*carcinoma in situ*). При опроміненні довжиною хвилі 308 нм в спектрі спостерігалась широка смуга флюоресценції з двома максимумами на довжинах хвиль 360 нм і 440 нм відповідно, для здорової тканини. Пік на довжині хвилі 360 нм пов'язують з флюоресценцією однієї з амінокислот, а саме - триптофану. В отриманих спектрах для злоякісних тканин немає максимуму на довжині хвилі 440 нм, і тому критерієм злоякісності тканини є співвідношення інтенсивностей $I(360)/I(440)$. На основі цього

співвідношення можна відрізнити злоякісні області, включаючи початкові стадії розвитку раку (*carcinoma in situ*) від нормальних, та областей, де спостерігається запалення.

Baert та співавт. [13] досліджували в живому організмі флюоресценцію різних тканин сечового міхура у пацієнтів після введення фотофрину (Photofrin - фотосенсибілізатор для виявлення пухлин в організмі) В якості джерела збудження використовувалась ртутна лампа, в якості приймача - оптичний багатоканальний аналізатор. Флюоресценція тканин і фото сенсибілізатора досліджувалась за умови опромінення довжиною хвилі збудження 337 і 405 нм відповідно. При опроміненні довжиною хвилі 405 нм спостерігалась флюоресценція на довжині хвилі близько 630 нм, що відповідала випромінюванню фотофрину, а флюоресценція пухлини, що спостерігалась на довжині хвилі близько 500 нм, виявилась більш низькою за інтенсивністю, ніж випромінювання здорової тканини. Таким чином, падіння інтенсивності випромінювання можна використовувати, як діагностичний критерій. Результати показують чітке розмежування між здоровими клітинами та злоякісними.

Таким чином, базуючись на результатах досліджень, можна зробити висновок, що, хоча методами флюоресценції на сьогоднішній день неможливо діагностувати стадію раку, проте, зменшення інтенсивності флюоресценції в спектрі тканини, а також характерні зміни форми спектру можуть бути критеріями для визначення її злоякісності.

Також, за допомогою методів флюоресценції можна розрізняти нормальні тканини і ті, що уражені дисплазією (наслідки неправильного формування тканин, клітин або органів у процесі розвитку організму) [14].

Флюоресценція компонент крові

В тілі людини флюоресціюють не лише тканини, а й кров. Кров дуже складний об'єкт для дослідження, складається з декількох компонент: плазми і формених елементів - еритроцитів, тромбоцитів та лейкоцитів. Кожен з них флюоресціює, а спектр крові є результатом накладання випромінювання від різних компонент.

Флюоресценція деяких елементів, наприклад, еритроцитів, на сьогоднішній день досліджена краще, ніж інших. Плазма, флюоресціює завдяки наявності в її складі білків [1,16,26], що складаються з амінокислот, три з яких (феніл-

аланін, триптофан і тирозин) проявляються в спектрах поглинання і флюоресценції, оскільки містять в собі замкнені π -електронні системи. Такі само як і макромолекули ДНК і РНК [1,2,3]. Спектри флюоресценції цих амінокислот були отримані [1] при низьких температурах. Триптофану притаманні дві смуги поглинання в області 280 і 218 нм, випромінювання в діапазоні 310-400 нм, а максимум флюоресценції відповідає довжині хвилі 350 нм. Саме присутність триптофану, навіть в невеликих кількостях, суттєво впливає на характер досліджуваних спектрів. Для тирозину максимум поглинання спостерігається на довжинах хвиль 222 нм і 275 нм, випромінювання спостерігається в спектральному діапазоні 280-310 нм, а максимуму випромінювання відповідає довжина хвилі 303 нм.

Для феніл-аланіну максимум поглинання спостерігається на довжині хвилі 257 нм, а основний максимум в спектрі флюоресценції відповідає довжині хвилі 282 нм. Фенілаланін майже не проявляється в спектрах, оскільки його квантовий вихід дуже малий. Спектри поглинання і флюоресценції відповідних амінокислот наведено на рис. 1 і рис. 2.

В червоній області спектру флюоресціюють зеднання порфірину – найбільш інтенсивна смуга в області 600-650 нм, менш інтенсивна – в більш довгохвильовій області [17]. Порфірини входять до складу молекули гемоглобіну, який в свою чергу міститься в еритроцитах. Саме завдяки наявності гемоглобіну еритроцити люмінесціюють червоним світлом.

Інші речовини, що флюоресціюють в видимій області спектра, є нікотинамідаденіндинуклеотидфосфати (НАДН і НАДФН) і флавінопротеїди.

Ці речовини приймають участь в процесах тканинного дихання, тому будь-які зміни в процесах дихання відображаються на їх властивостях. НАДН має смуги поглинання в області 260 нм і 340 нм і спектр флюоресценції за максимумом в інтервалі 455-480 нм. Серед флавінопротеїдів флюоресціюють похідні від рибофлавіну з максимумом на довжині хвилі 530 нм.

Ще одним компонентом крові є еритроцити – червоні кров'яні тіลця опуклої форми, що забезпечують транспорт кисню до тканин організму завдяки наявності в них гемоглобіну. Наявність гемоглобіну визначає спектральні властивості еритроцитів. В спектрах поглинання проявляються дві смуги – в УФ області, що

обумовлено наявністю ароматичних амінокислот в складі гемоглобіну, і в діапазоні хвиль 400-420 нм, що відповідає поглинанню порфіринів [24].

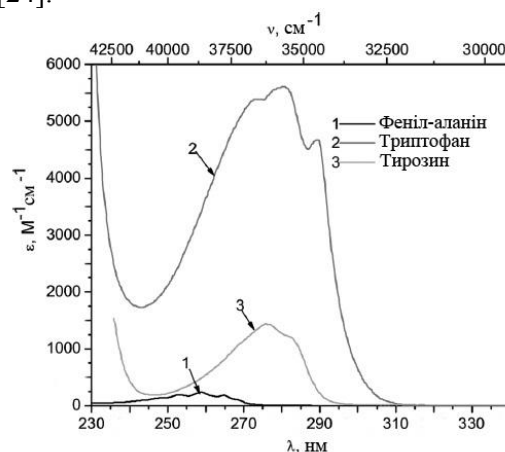


Рис. 1. Спектр поглинання амінокислот, тирозину(1), триптофану(2), фенілаланіну(3).

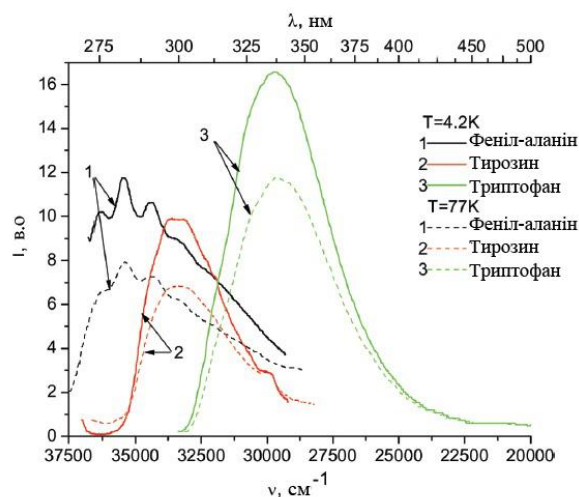


Рис. 2. Спектр флюоресценції амінокислот при температурі $T=4.2$ K(1-3) і 77K (1'-3').

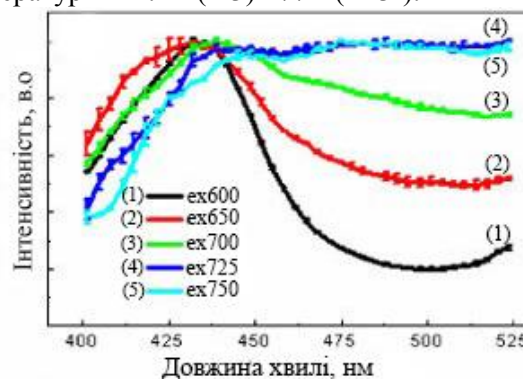


Рис. 3. Спектр двофотонної флюоресценції гемоглобіну.

Флюоресценція гемоглобіну проявляється в спектральному діапазоні 400-525 нм, з максимумом, що відповідає довжині хвилі 440 нм

[25]. Відповідний спектр флюоресценції наведено на рис. 3.

Флюоресценція інших компонентів крові: тромбоцитів і лейкоцитів поки що, нажаль, досліджена мало, наприклад [9]. В наведеній роботі були проведені експериментальні спроби відрізнити здорові лейкоцити, що формують імунітет людини від вражених лімфою. Були створені 5 зразків – виділені Т-лімфоцити людини стимульовані CD3 і CD28; чисті Т-лімфоцити, без стимуляції; β -лімфоцити культури СА46; і два зразки – суміш Т-лімфоцитів стимульованих CD3 і CD28 і культури СА46 в пропорціях 1:3 і 3:1 відповідно. Зразки збуджувались трьома довжинами хвиль (351 нм, 458 нм і 488 нм) і досліджувались за допомогою конфокального мікроскопа. Спектри випромінювання здорових Т-лейкоцитів і лімфатичної культури можна чітко розрізнити. Спектри випромінювання лімфатичної культури СА46 мали найменшу інтенсивність випромінювання при збудженні довжиною хвилі 351 нм, і найбільшу при збудженні в більш довгохвильовому діапазоні – наприклад, 488 нм. Для сумішей випромінювання інтенсивність впала відповідно до наявності чистих Т-лейкоцитів в зразку. Ці дослідження показують що можна клінічно відрізнити лімфатичні клітини СА46 від здорових клітин крові за допомогою методу флуоресцентного аналізу. І це може бути критерієм діагностики внутрішньочочної лімфоми (intraocular lymphoma).

Вивчення результатів експериментальних досліджень, де були здійснені спроби застосувати метод аналізу флюоресценції в діагностиці різноманітних злоякісних пухлин показує перспективність даного методу.

Останні роки статика захворюваності на рак впевнено зростає і тому проблема діагностики є дуже актуальною.

На сьогоднішній день метод флюоресценції не дозволяє з 100% точністю визначити злоякісність тканини, оскільки підходи до флуоресцентної діагностики злоякісних пухлин засновані на особливостях їх метаболізму. [18,19]. Але при онкологічних захворюваннях мають місце характерні зміни в складі тканини, і тому за допомогою методу флуоресцентного аналізу можна отримати інформацію про наявність або відсутність злоякісних новоутворень.

Висновки

На сьогоднішній день неможливо впевнено встановити люмінесцентними методами стадію

розвитку захворювання, але, безумовно, даний метод повинен використовуватись щонайменше як метод контролю традиційних методів діагностики. Досліджувана методика має багато переваг. Серед них безпечність, наочність, безболісність методики, а також те, що вона не пов'язана з хірургічним втручанням і не потребує довгого очікування на результат, не потребує специфічних і дорогих реактивів.

Список використаних джерел

1. Yashchuk V.M, Kudrya V.Y., Losytsky M.Y, Dubey I.Y., and Suga H. Electronic Excitation Energy Transfer in DNA. Nature of Triplet Excitations Capturing Centers// Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2007. - № 467. - P. 311–323.
2. Yashchuk V., Kudrya V, Losytsky M., Suga H, Ohul'chansky T. The nature of the electronic excitations capturing centres in the DNA// Journal of Molecular Liquids. – 2006. - № 127. – P. 79–83.
3. Morguet, A., Korber, B., Abel, B., Hippler, H., Wiegand, V and Kreuzer, H. Autofluorescence spectroscopy using a XeCl excimer laser system for simultaneous plaque ablation and fluorescence excitation// Lasers Surg. Med. – 1994. - № 14. – P. 238-248.
4. Bartorelli, A.L., Leon, M.B., Almagor, Y., Prevosti, L.G., Swain, J.A., McIntosh, C.L., Neville, R.F., House, M.D. and Bonner, R.F. In vivo atherosclerotic plaque recognition by laser excited fluorescence spectroscopy// J. Am. Cardiol. – 1991. - № 17. – P. 60-68.
5. Alfano, R.R., Tang, G.C., Pradham, A., Lam, W., Choy, D.S. and Opher, E. Fluorescence spectra from cancerous and normal human breast and lung tissues// IEEE J. Quantum Electron. QE-23:1806-1811, 1987.
6. Andersson-Engels, S., Elner, A., Johansson, J., Karlson, S-E, Salford, L.G., Stromblad, L-G, Svanberg, K. and Svanberg, S. Clinical recording of laser induced fluorescence spectra for evaluation of tumor demarcation feasibility in selected clinical specialties// Lasers Med. Sci. – 1991. - № 6. – P. 415-424.
7. Kravchenko V.M., Buriy O.M., Kovalchuk I.M, Yashchuk V.M., Kushnir K.M. Autofluorescent biomolecular sensor for early cancer diagnostics // 9th European Conference On Atoms Molecules & Photons, May 6–11, 2007, Heraklion, Crete, Greece. – Tu3-12.

8. *Pantanelli S.M., Li Z., Fariss R., Mahesh S.P., Liu B., Nussenblatt R.B.* Differentiation of Malignant B-Lymphoma Cells from Normal and Activated T-Cell Populations by Their Intrinsic Autofluorescence//Cancer Res. – 2009. - № 69. – P. 4911-4917.
9. *Kapadia C.R., Cutruzzola F.W., O'Brien K.M., Stetz M.L., Enriquez R. and Deckelbaum L.I.* Laser-induced fluorescence spectroscopy on human colonic mucosa.//Gastroenterology. - 1990. - № 99. – P. 50-157.
10. *Koenig, F., McGovern, F.J., Althausen, A.F., Deutsch, T.F. and Schomacker, K.T.* Laser induced autofluorescence diagnosis of bladder cancer//J. Urol. – 1996. - № 156 – P. 1597 - 1601.
11. *Anidjar, M., Ettori, D., Cussenot, O., Meria, P., Desgrandchamps, F., Cortesse, A., Teillac, P., Le Due, A. and Avrillier, S.* Laser induced autofluorescence diagnosis of bladder tumors: Dependence on the excitation wavelength.//J. Urol. – 1996. - № 156. – P. 1590.
12. *Baert, L., Berg, R., VanDamme, B., D'Hallewin, M.A., Johansson, J., Svanberg, K. and Svanberg, S.* Clinical fluorescence diagnosis of human bladder carcinoma following low-dose Photofrin injection// Urology. - 1993. - № 41. – P. 322.
13. *Lam, S., MacAulay, C., Hung, J., LeRiche, J., Profio, A.E. and Palcic, B.* Detection of dysplasia and carcinoma in situ with a lung imaging fluorescence endoscope device.//J. Thoracic Cardiovasc. Sur. – 1993. - № 105. – P. 1035-1040.
14. *Kittrell, Willett, R.L., de los Santos-Pacheo, C., Ratcliff, N.B., Kramer, J.R., Malk, E.G. and Feld, M.S.* Diagnosis of fibrous arterial atherosclerosis using fluorescence// Appl. Optics. – 1985.- № 24. – P. 2280-2281.
15. *Lakowicz J.* Principles of Fluorescence Spectroscopy. – Moscow: Mir., 1986 (in Russian)
16. *Pushkarev S.V., Naumov S.A., Vovk S.M., Smolianinov E.S.* Spectroscopic diagnostics of malignant tumors// Optoelectronics. - 2000. - № 1. - P. 84. (in Russian)
17. *Sein I.F., Knyazev P.G.* Molecular Oncology: A Guide for Physicians. Medicine, 1986 (in Russian)
18. *Dickstein E.A., Vasilenko I.V., Danil'chenko S.A., Shevchenko N. I.* The ultrastructure of vascular breast cancer // Archives of Pathology. - 1990. - № 11. - P.41. (in Russian)
19. *Zheng W., Lau W., Cheng C., Chee Soo K. and Olivo M.* Optical excitation-emission wavelengths for autofluorescence diagnosis of bladder tumors.// International Journal of Cancer. - 2003.- № 4 - P. 477-481.
20. *Yavari N.* Optical Spectroscopy for Tissue Diagnostics and Treatment Control// Ph.D. dissertation, Department of Physics and Technology, April 2006, University of Bergen, Norway.
21. *Baraga, J.J., Rava, R.P., Taroni, P., Kittrel, C., Fitzmaurice, M. and Feld, M.S.* Laser induced fluorescence of normal and atherosclerotic human aorta using 306-310 nm excitation //Lasers Surg. Med., - 1990. - № 10 –P. 245
22. *Deckelbaum, L.I., Sarembock, I.J., Stetz, O'Brien, K.M. Cutruzzola, F.W., Gmitro, A.F. and Ezekowitz, M.D.* In vivo fluorescence spectroscopy of normal and atherosclerotic arteries//SPIE. – 1988. - № 906. – P. 314-319.
23. *Schuplova E.A., Fadeev S.B.* Spectral analysis of hemoglobin by microorganisms with different levels of anti-hemoglobin activity //Modern problems of science and education. - 2013. - № 2.
24. *Wei Zheng, Dong Li, Yan Zeng, Yi Luo, and Jianan Y. Qu.* Two-photon excited hemoglobin fluorescence//Biomed Opt Express. – 2011. - № 1. – P. 71–79.
25. *Li B., Zhang Z., Xie S., Chen R.* Three-dimensional Fluorescence Spectra of Human Blood//Biomedical Optics, edited by Gert von Bally, Qingming Luo, Proc. of SPIE. – 2006. - № 6026.
26. *Chen P., Zhang L., Zhang F., Liu JT., Bai H., Tang GQ., Lin L.* Spectral discrimination between normal and leukemic human sera using delayed luminescence//Biomedical Optics Express. – 2012. - № 8. - P. 1787-1792.

Надійшла до редколегії 24.10.13

УДК 538

Чумаченко А.В., к.ф.-м.н., асист.

Розрахунок фазових переходів в одновимірній моделі Ізінга методом розкладу за сингулярними значеннями

Новий ефективний метод для розрахунку фазових діаграм одновимірних квантових спінових систем використано для моделі Ізінга з поперечним магнітним полем. Отримані результати порівняно з точним аналітичним розв'язком для даної моделі.

Ключові слова: фазові переходи, спінові системи, перенормування матриці густини.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: chumachenko.a@gmail.com

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Єжов С.М.

Introduction

Spin models investigated in this paper are widely used in the theoretical physics. The aim of this paper is to investigate a new and efficient method for studies of the phase diagrams of yet unstudied spin Hamiltonians. The idea of such investigation was first suggested by Anders et al. [1]. The method is based on the singular value decomposition (SVD) of the space correlation tensor (or displacement matrix). For this case SVD is very closely related to the problem of proper orthogonal decomposition (POD), also known as Karhunen-Loeve transform, introduced by Kosambi [2] and to the principal component analysis introduced by Hotelling [3] (See review [4]). POD is a procedure for extracting a basis for a modal decomposition from an ensemble of signals. This is very efficient and optimal method in the sense that for a given number of modes, the projection on the subspace used for modelling the random field will on average contain the most energy possible [5] and given by so called proper orthogonal modes (POMs). Finding of POMs of given physical problem is correlated to the transformation to eigen basis of the given physical model with respect to specific observable (correspondent analogy from mechanics will be the main axis transformation). As it was shown in [5] POD can be carried out by means of singular value decomposition.

A.V. Chumachenko¹, PhD

Calculation of the phase transitions in one-dimensional Ising model using singular value decomposition method

New efficient method for investigation of the phase diagrams of one-dimensional quantum spin-systems applied to standard Ising model with transverse magnetic field. Obtained results are compared with exact analytical answer for this model.

Key Words: phase transitions, quantum spin systems, density matrix renormalization group.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: chumachenko.a@gmail.com

Singular value decomposition

Principal component analysis (PCA) is a mathematical procedure that uses an orthogonal transformation to convert a set of observations of possibly correlated variables into a set of values of uncorrelated variables called principal components. The number of principal components is less than or equal to the number of original variables. This transformation is defined in such a way that the first principal component has as high a variance as possible (that is, accounts for as much of the variability in the data as possible), and each succeeding component in turn has the highest variance possible under the constraint that it be orthogonal to (uncorrelated with) the preceding components. Principal components are guaranteed to be independent only if the data set is jointly normally distributed. PCA is sensitive to the relative scaling of the original variables. Depending on the field of application, it is also named the discrete Karhunen-Loeve transform (KLT), the Hotelling transform or proper orthogonal decomposition (POD). PCA was invented in 1901 by Karl Pearson [6]. Now it is mostly used as a tool in exploratory data analysis and for making predictive models. PCA can be done by eigenvalue decomposition of a data covariance matrix or singular value decomposition of a data matrix, usually after mean centering the data for each attribute. The results of a PCA are usually discussed in terms of component

scores (the transformed variable values corresponding to a particular case in the data) and loadings (the weight by which each standardized original variable should be multiplied to get the component score).

PCA is the simplest of the true eigenvector-based multivariate analyses. Often, its operation can be thought of as revealing the internal structure of the data in a way which best explains the variance in the data. If a multivariate dataset is visualised as a set of coordinates in a high-dimensional data space (1 axis per variable), PCA can supply the user with a lower-dimensional picture, a “shadow” of this object when viewed from its (in some sense) most informative viewpoint. This is done by using only the first few principal components so that the dimensionality of the transformed data is reduced.

The purpose of singular value decomposition is to reduce a dataset containing a large number of values to a dataset containing significantly fewer values, but which still contains a large fraction of the variability present in the original data. Applying the SVD to space correlation matrix we obtain the most persistent structure of the correlations for each POM. In this paper we use SVD in order to calculate the phase diagrams for 1D Ising model spin chains (rings) in the transverse magnetic field.

XY model with transverse magnetic field

The *XY model with transverse field* for a system of spin-1/2 on a lattice is given by the Hamiltonian

$$H = \sum_{\{a,b\} \in \mathcal{B}} -\frac{1+\gamma}{2} \sigma_z^{(a)} \sigma_z^{(b)} - \frac{1-\gamma}{2} \sigma_y^{(a)} \sigma_y^{(b)} - \sum_{a \in V} B \sigma_x^{(a)}$$

where $\sigma_{x,y,z}$ are the Pauli matrices, $\mathcal{B}$ is the set of all pairs of spins, on which a term act jointly; $\mathcal{B}$ the transverse field and γ is called the asymmetry. For $\gamma = 0$, we get a special case the *XX model* and for $\gamma = 1$, we get the *Ising model*.

As it was shown in [7] for the finite chain the critical regions are: *XX criticality* at $\gamma = 0$ for $0 < B < 1$ and *XY criticality* for $B = 1$, $\gamma \neq 0$ (*Ising criticality* for $B = \gamma = 1$).

The phase diagram which describes the critical regions are shown on Fig. 1.

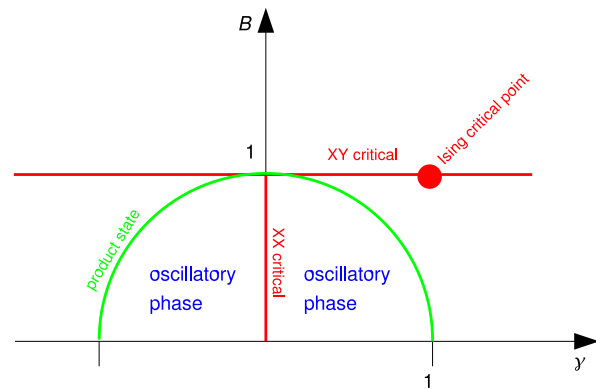


Fig.1 Phase diagram of XY model for 1D spin chain [7].

Numerical calculations which can confirm the critical behavior of the correlation functions can be done using the DMRG algorithm. Critical behavior of the correlations can be seen from the plots of the singular values of the correlation matrix $(\langle \sigma_i^{(a)} \sigma_j^{(b)} \rangle - \langle \sigma_i^{(a)} \rangle \langle \sigma_j^{(b)} \rangle)_{i,j=x,y,z}$.

Calculation of the correlation functions separately are not showing yet predicted by [7] phase diagram. Three dimensional plot of correlation functions can be seen from Fig. 3

Rest of the correlation functions $\langle \sigma_x^a \sigma_y^b \rangle$, $\langle \sigma_x^a \sigma_z^b \rangle$, $\langle \sigma_y^a \sigma_z^b \rangle$ and etc. are effectively zero. As we can see our correlations correctly reproduce the analytical predictions made in [7] about vanishing of the correlations while approaching to the points on the Baruch-McCoy circle, which is defined by $B^2 + \gamma^2 = 1$. On this circle the ground state has product form [7]. This behavior can be clearly seen from second and third plots which corresponds to middle and lowest singular values of the correlation matrix respectively. Maximal singular value is not very informative for this type of calculations because of the strong criticality at $\gamma = 0$.

From the Fig. 2 we also can see that critical behavior at $\gamma = 0$ (*XX criticality*) is much stronger than *XY criticality*. *Ising critical point* at $\gamma = B = 1$ do not have that strong critical behavior as at $\gamma = 0$. This picture of the correlation functions behavior is in qualitative agreement with behavior of the amount of entanglement in this regions (See Fig. 3 in [8]).

Calculations of the magnetization M_x and M_z which are given as

$$M_{(z,x)} = \frac{1}{N} \langle 0 | \sum_{j=1}^N \sigma_{(x,z)}^j | 0 \rangle$$

here $|0\rangle$ in our DMRG calculations is an eigenvector which corresponds to the lowest eigenvalue measured in the middle of the chain. For periodic

boundary conditions this condition is irrelevant because of the ring symmetry.

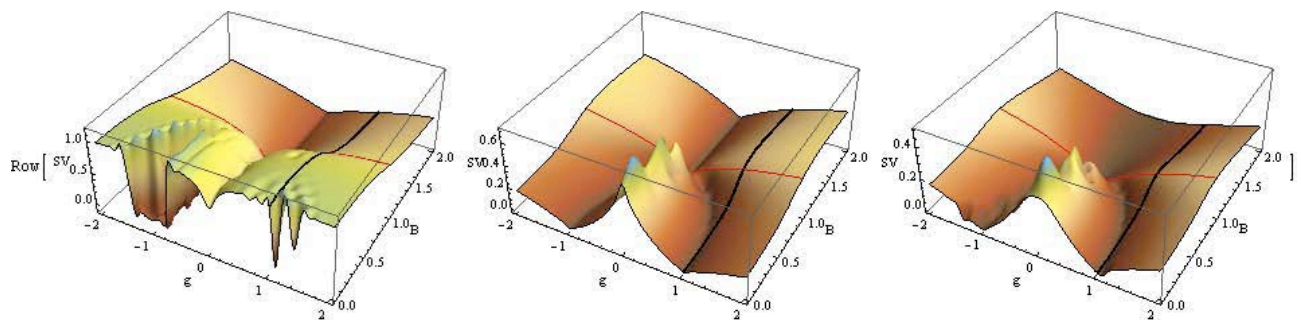


Fig.2. Singular values of the correlation matrix from the maximal (right plot) to minimal (left plot) for the ring of 16 spins.

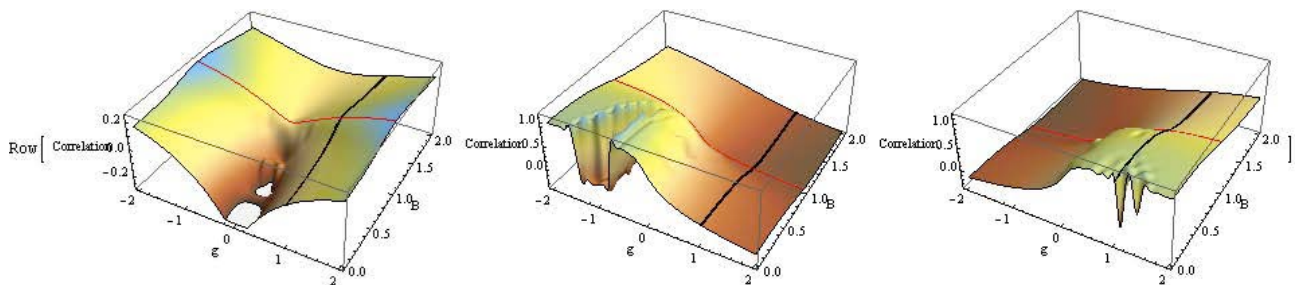


Fig.3. XX, YY and ZZ correlation functions from left to right.

Results for the magnetization M_x and M_z as a function of the parameters of the Hamiltonian is given on Fig. 4.

As we can see from this figures M_z magnetization for such a small system do not

have a symmetry breaking and essentially equals zero. M_x magnetization as it is expected grows with magnetic field B until system is fully magnetized.

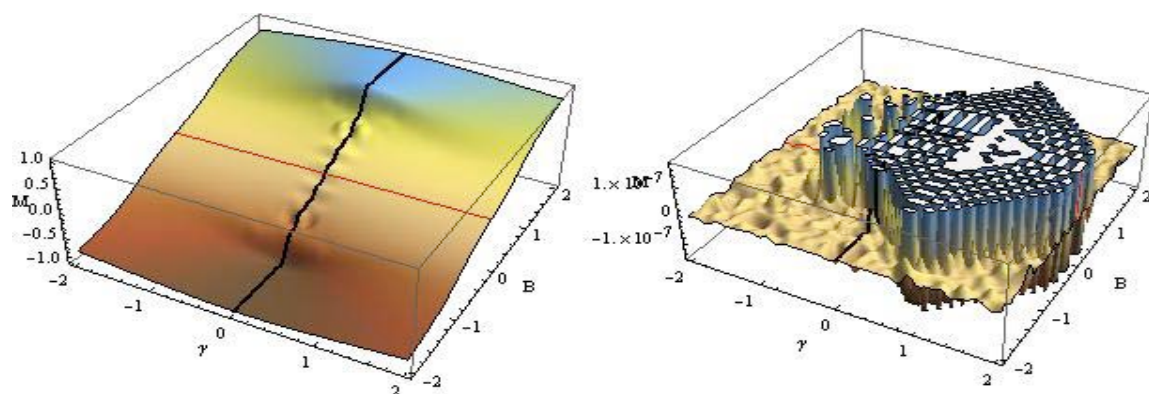


Fig.4. Magnetization as a function of the asymmetry and magnetic field for a 16 spins with open boundary conditions. Left: M_x . Right: M_z .

The interesting region for M_x magnetization, as we can see from Fig. 4, is at asymmetry value $\gamma = 0$.

In this regime magnetization grows stepwise unless for the Ising case when $\gamma = 1$.

One can expect that increasing the number of sites in the quantum system magnetization at $\gamma = 0$ and $\gamma = 1$ shown on Fig. 4 will get closer and for the infinite system will coincide.

Another interesting results can be obtained introducing the explicit symmetry braking in the initial Hamiltonian that it takes the form of

$$H = \sum_{\{a,b\} \in \mathcal{B}} -\frac{1+\gamma}{2} \sigma_z^{(a)} \sigma_z^{(b)} - \frac{1-\gamma}{2} \sigma_y^{(a)} \sigma_y^{(b)} - \sum_{a \in V} B \sigma_x^{(a)} - h \sigma_z^1$$

In this case magnetization M_z is not zero any more and shown on Fig. 5

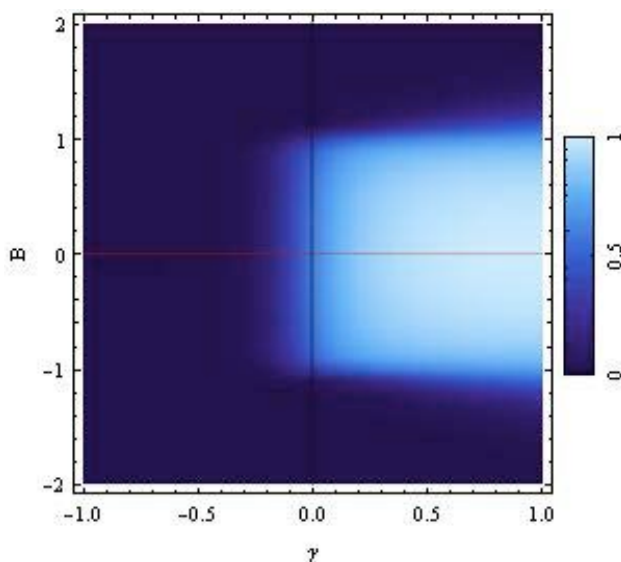


Fig.5. Magnetization M_z as a function of the B and γ for chain of $N = 16$ spins with symmetry braking.

The density plot of the M_z magnetization is given on the Fig. 5.

More clear the “classical” behavior of the M_z magnetization can be seen for the Ising model ($\gamma = 1$). This order parameter as a function of the magnetic field is given on Fig. 6.

As we can see the decay of the M_z magnetization become stronger if system is large. At thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$ the M_z is expected to vanish at the critical point $B = 1$.

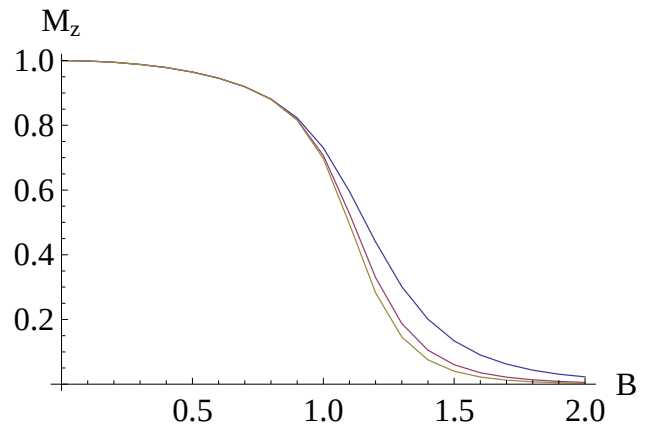


Fig.6. Magnetization M_z as a function of the B for $\gamma = 1$ (Ising) for chain of $N = 12$ (upper plot) $N = 16$ (middle plot) and $N = 18$ (lower plot) spins with symmetry braking.

References

- [1]. Anders S., Briegel H.J., and Dur W. A variational method based on weighted graph states. // New Journal of Physics, - 2007 – Vol. 9, P. 361.
- [2]. Kosambi, D. D. (1943), Statistics in Function Space // Journal of the Indian Mathematical Society – 1943 – Vol. 7, P. 76–88.
- [3]. Hotelling H., Analysis of a Complex of Statistical Variables into Principal Components. // Journal of Educational Psychology, - 1933 – Vol.24, P.417–441.
- [4]. G. Kerschen, J.C. Golinval, A.F. Vakakis and L.A. Bergman, The Method of Proper Orthogonal Decomposition for Dynamical Characterization and Order Reduction of Mechanical Systems: An Overview // Nonlinear Dynamics – 2005 – Vol.41, P.147–169.
- [5]. G. Kerschen and J.C. Golinval, Physical interpretation of the proper orthogonal modes using the singular value decomposition // Journal of Sound and vibration – 2002 – Vol. 249, N. 5, 849-865
- [6]. Pearson K., "On Lines and Planes of Closest Fit to Systems of Points in Space" Philosophical Magazine – 1901 – Vol. 11, N.2, P. 559–572.
- [7]. Barouch E. and McCoy~B. M., Statistical mechanics of the xy model. ii. spin-correlation functions // Phys. Rev. A, – 1971 – Vol. 3, P. 786.
- [8]. Latorre J.I., Lutken C.A., Rico E., and Vidal G., Fine-grained entanglement loss along renormalization-group flows // Physical Review. – 2005 – Vol.71, P. 034301.

Надійшла до редколегії 05.07.13

УДК 535.3

Якунов А.В.¹, к.ф.-м.н., доц.
Кузькова Н.В.², студ.

Застосування температурної залежності флуоресценції розчинів органічних барвників для вимірювання поглинання міліметрових хвиль у воді

Температурну чутливість флуоресценції розчинів органічних барвників використано для безконтактного вимірювання поглинання електромагнітних хвиль міліметрового діапазону у воді. За допомогою двох барвників з протилежними температурними ефектами визначено локальне підвищення температури в капілярі, розміщеному в середині прямокутного хвильоводу. Отримані результати вказують на відсутність нетеплового впливу міліметрових хвиль на воду.

Ключові слова: міліметрові хвилі, безконтактне вимірювання температури, флуоресценція, органічні барвники

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: yakunov@univ.kiev.ua
²nkuzkova@gmail.com

A.V. Yakunov¹, Ph.D., Associate Professor
N.V. Kuzkova², stud.

Application of temperature-dependent fluorescent dyes to the measurement of millimeter waves absorption in water

Temperature sensitivity of the fluorescence intensity of organic dyes solutions used for non-contact measurement of the electromagnetic millimeter waves absorption in water. By using two different dyes with opposite temperature effects it was defined local temperature increase in the capillary, placed inside a rectangular waveguide. Our results indicate to the absence of non-thermal effects of millimeter waves on the water.

Key Words: millimeter waves, non-contact temperature sensing, fluorescence, organic dyes

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: yakunov@univ.kiev.ua
²nkuzkova@gmail.com

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Біологічні ефекти електромагнітних хвиль міліметрового діапазону (ЕМХ ММД) спостерігались в багатьох експериментах на різних біологічних об'єктах: від бактерій до цілісного організму людини, а також модельних системах [1]. Неодноразово відзначається, що характер дії ЕМХ ММД на біоб'єкти відрізняється від звичайної теплової дії електромагнітних хвиль інших діапазонів, причому фізична природа цього явища до сьогодні залишається незрозумілою. Одним із проблемних питань, відповідь на яке могла б сприяти побудові адекватної фізичної моделі, є визначення критерію, так званого "нетеплового впливу", що вимагає точного вимірювання температури опромінюваних об'єктів.

Вважається, що використання малопотужних (з вихідною потужністю до 20 мВт) генераторів ММД не призводить до значного нагріву опромінюваної речовини. Для різних схем

опромінення розрахунки дають приріст температури від 0.1° до 0.5° [2], що не повинно викликати суттєвих біологічних наслідків. Разом з тим, безпосереднє вимірювання зміни температури в зоні опромінення зразка є складною технічною задачею. Високочутливі датчики температури (термопари, термістори, мініатюрні безкорпусні транзисторні пари) вносять збурення в досліджувані зразки, впливають на локальну температуру і характеристики теплообміну в даному місці. Оптичні методи, хоча і менш точні, але зручніші для реєстрації зміни температури в малих об'єктах [3].

В міліметровому діапазоні вода характеризується значним поглинанням електромагнітних хвиль. Зокрема, на частоті 50 ГГц, що відповідає довжині хвилі у вакуумі 6 мм, коефіцієнт поглинання дорівнює 5.1 мм^{-1} [2]. Відповідно, просторовий температурний розподіл в опромінюваних зразках, що містять воду, є дуже неоднорідним. ЕМХ ММД нагріває водомісткі речовини в тонкому приповерхневому шарі з великим градієнтом температури, чисельне значення якого вдається

оцінити лише непрямыми методами. З цим пов'язана недосконалість існуючих методик опромінення біологічних об'єктів, мала надійність засобів метрологічного контролю.

Для визначення зміни температури води при поглинанні ЕМХ ММД ми застосували оптичний безконтактний метод, який базується на існуванні залежності від температури інтенсивності флуоресценції водних розчинів органічних барвників. Ми виміряли локальне підвищення температури в капілярі, розміщеному в середині прямокутного хвилеводу, по якому розповсюджується ЕМХ. Для вимірювання використовувались два барвники з протилежними температурними ефектами: родамін 6Ж (Р6Ж) та родамін С (РС).

Експериментальна частина

Калібрування залежності інтенсивності флуоресценції водних розчинів органічних барвників від температури було проведено за допомогою дифракційного спектрометра МДР-3. Як джерело збудження використовувався напівпровідниковий лазер ($\lambda = 406 \text{ нм}$, $P = 60 \text{ мВт}$). Розчини готувались на основі стандартної дистильованої води для ін'єкцій. Концентрація барвників ($\sim 1 \text{ ммоль/л}$) обиралась із умови максимальної температурної чутливості та приблизної рівності температурних коефіцієнтів [3]. Спектри флуоресценції записувались при температурі від 20 до 40°C через кожних 5°C . Інтенсивність флуоресценції нормувалась на початкове значення, що відповідала температурі 20°C (рис. 1).

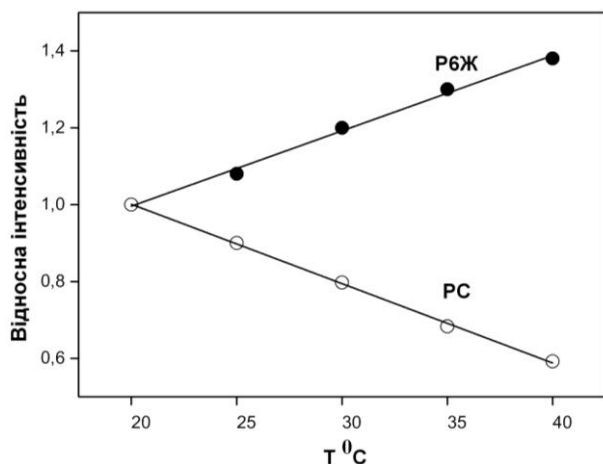


Рис. 1. Залежність відносної інтенсивності флуоресценції від температури для двох розчинів барвників.

Існує, щонайменше, два сценарії температурної поведінки флуоресценції розчинів барвників [3]. У більшості випадків підвищення температури вносить деструктивний внесок у вихід

флуоресценції. З ростом температури збільшується частота і енергія зіткнень молекул в розчині, а також, амплітуда внутрішньої молекулярних коливань, що призводить до збільшення константи безвипромінювальної релаксації зі збуджених рівнів, і, відповідно, гасіння флуоресценції.

Разом з температурним гасінням в розчинах барвників можливі механізми, які збільшують загальний вихід флуоресценції з ростом температури [4]. Зокрема, деякі органічні молекули у водному розчині схильні до утворення асоційованих комплексів: димерів, тримерів, тощо, квантовий вихід флуоресценції яких значно менший, ніж у окремих молекул. При достатньо великих концентраціях спектр флуоресценції формується як суперпозиція спектрів окремих молекул та їх асоціатів. Зі збільшенням температури частина асоціатів розпадається на окремі молекули, що супроводжується відносним збільшенням інтенсивності флуоресценції.

З рис. 1 випливає, що реакція розчину РС на вплив температури відповідає першому сценарію, а Р6Ж – другому, причому температурні залежності відносної інтенсивності флуоресценції в діапазоні $20 \div 40^\circ\text{C}$ апроксимуються лінійною функцією: $I(T)/I(20^\circ\text{C}) = a + bT$, де b – коефіцієнт температурної чутливості. Для заданих концентрацій розчинів цей параметр дорівнює $b_{R6G} = 0.019^\circ\text{C}^{-1}$ та $b_{RC} = -0.021^\circ\text{C}^{-1}$.

Випромінювання ММД від генератора сигналів високої частоти Г4-141 через поляризаційний атенуатор ДЗ-37 подавалось на вимірювальний модуль (рис.2): відрізок прямокутного хвилеводу з перерізом $7.2 \times 3.4 \text{ мм}$, в середину якого по центру перпендикулярно до широких стінок було вставлено скляний капіляр з внутрішнім діаметром 0.5 мм . Сфокусований промінь напівпровідникового лазера збуджував флуоресценцію розчину барвника, який заповнював капіляр.

Для капіляру з водою в прямокутному хвилеводі область максимального поглинання ЕМХ ММД відповідає пучності електричної компоненти і зосереджена в центральній частині розмірами $\Delta x \approx 1 \text{ мм}$ [5]. Сигнал флуоресценції з центральної ділянки виводився через круглий отвір, зроблений посередині вузької стінки хвилеводу напроти капіляру.

Світловий потік фокусувався лінзою і проходив через світлофільтр ОС-12 на фотоприймач ФД-18К. Електричний сигнал підсилювався і подавався на аналого-цифровий перетворювач з подальшою реєстрацією на персональному комп'ютері.

Частина випромінювання, що подавалась на вимірювальний модуль, через хвильовий спрямований відгалужувач поступала на вимірювач потужності МЗ-22 і реєструвалась як сигнал, пропорційний до вхідної потужності ($\alpha \cdot P_{in}$), де $\alpha = 0.1$ – коефіцієнт відгалужувача. Аналогічно, частина випромінювання, що пройшла через модуль, реєструвалась як сигнал, пропорційний до вихідної потужності ($\alpha \cdot P_{out}$). Різниця $\Delta P = P_{in} - P_{out}$ дорівнювала потужності, що поглинулась у зразку. Попередньо в діапазоні 40 – 50 ГГц була виміряна частотна залежність поглинання в капілярі з водою. На частоті 47,5 ГГц спостерігався чітко виражений резонансний максимум, характерний для прямокутного хвильоводу з діелектричним циліндром малого діаметру [5].

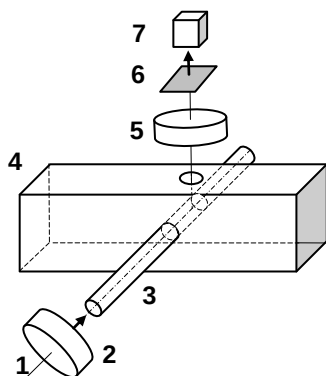


Рис. 2. Вимірювальний модуль: 1 – лазерний промінь, 2, 5 – фокусувальні лінзи, 3 – скляний капіляр з розчином барвника, 4 – хвильовод, 6 – світлофільтр, 7 – фотоприймач.

Подальші експерименти проводились на частоті резонансу. Потужність, що поглиналась у капілярі з розчином, регулювалась за допомогою поляризаційного атенюатора при коефіцієнтах затухання $\delta = 0, 1, 2, 3, 4$ дБ, які відповідали абсолютним значенням ΔP : 20 мВт; 15.8 мВт; 12.5 мВт; 10 мВт; 7.9 мВт.

Тривалість реєстрації сигналу $T \approx 40$ с обиралась із умови суттєвого перевищення часу встановлення теплової рівноваги: $T \gg \tau$. Константа релаксації оцінювалась за допомогою виразу $\tau \approx (\Delta x)^2 / D$, де D – коефіцієнт теплопровідності води, і для заданої схеми опромінення становила величину порядку кількох секунд.

Результати та їх аналіз

На рис.3 показано динаміку зміни інтенсивності флуоресценції розчинів барвників Р6Ж та РС при вмиканні та вимиканні ЕМХ ММД різної потужності. Поглинання мікрохвиль призводить до розгоряння

флуоресценції розчину Р6Ж та затухання – РС. Поступове зменшення інтенсивності флуоресценції зумовлене фотодеструкцією молекул органічного барвника. При тимчасовому виключенні лазерного випромінювання початковий рівень флуоресценції практично відновлюється.

З експериментальних даних отримано залежності відносної зміни інтенсивності флуоресценції $|I - I_{20}| / I$ від коефіцієнта послаблення атенюатора (рис.4). В першому наближенні їх можна апроксимувати лінійними функціями:

$$y = 0.15 - 0.023x \text{ для Р6Ж та}$$

$$y = 0.14 - 0.024x \text{ для РС.}$$

З урахуванням калібрувальної залежності (рис.1) отримано два значення локального підвищення температури в капілярі при максимальній поглинутій потужності 20 мВт: $\Delta T_1 = (7.7 \pm 0.4)^\circ\text{C}$ у випадку розчину Р6Ж; $\Delta T_2 = (7.4 \pm 0.4)^\circ\text{C}$ для розчину РС.

Слід зауважити, що висока концентрація барвників в розчинах зумовлює необхідність врахування залежності відповідних спектрів поглинання від температури [3]. Зміну інтенсивності флуоресценції може спричинити зміна як квантового виходу, так і інтенсивності збудження в області реєстрації світіння.

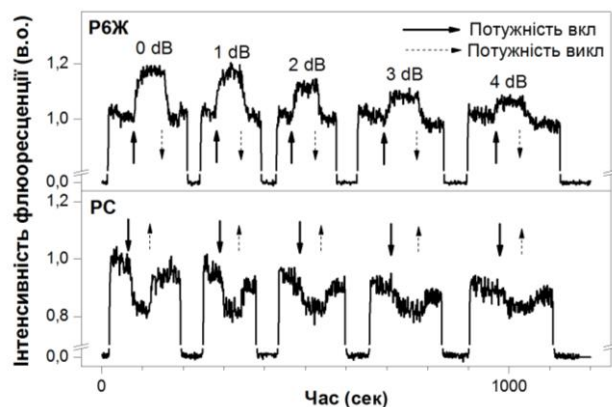


Рис. 3. Динаміка зміни інтенсивності флуоресценції при вмиканні та вимиканні ЕМХ ММД.

Для капіляру з водою в прямокутному хвильоводі область максимального нагріву відповідає пучності електричної компоненти і зосереджена в центральній частині. На периферійних ділянках розчин нагрівається менше і вплив температури на розповсюдження лазерного променя можна вважати малим у порівнянні із зміною квантового виходу.

У будь-якому разі, навіть малопотужне джерело ЕМХ ММД, за певних умов спричиняє значний нагрів зразка, що може призвести до суттєвих біологічних наслідків. Варто зазначити, що особливі умови експерименту (розміщення зразка усередині

хвилеводу, опромінення на резонансній частоті) визначають максимально можливий температурний відгук.

У переважній більшості біофізичних експериментів з ЕМХ ММД [2] умови опромінення зразків, хоча і не такі жорсткі, однак здійснюються у ближній зоні рупора чи хвилеводу. В околі опромінюваного об'єкту виникають стоячі хвилі, які формують паразитні резонанси. Поява областей локального підвищення температури на декілька градусів може спричинити тепловий біологічний ефект при загальному низькому рівні потужності випромінювання.

В роботах [6,7] робиться припущення, що при опроміненні ЕМХ ММД водних розчинів барвників можливий додатковий нетепловий вплив мікрохвиль на спектральні властивості розчинів, який відбувається через зміну структури води. Під час опромінення псевдополімерна сітка водневих зв'язків зазнає деформації, перегрупування, і, можливо, руйнування. Зміна структури води під дією мікрохвильового поля викликає структурні перестановки в молекулярних асоціатах і сприяє їх розпаду.

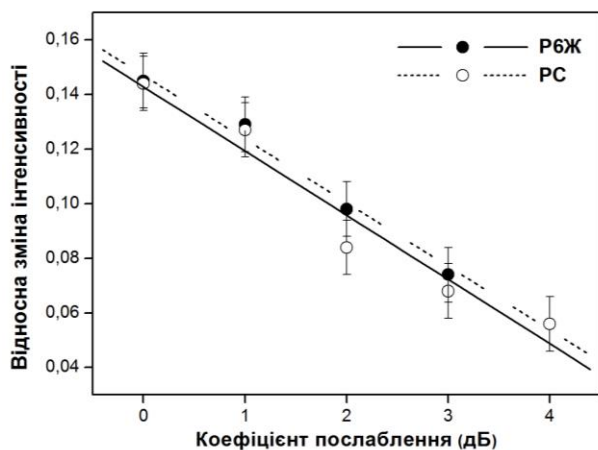


Рис. 4. Залежність інтенсивності флуоресценції від коефіцієнта послаблення атенюатора.

Отримані в наших дослідженнях однакові - в межах похибки - значення ефективної температури для розчинів з різними сценаріями температурної поведінки вказують на відсутність нетеплового впливу ЕМХ ММД на воду, принаймні, в умовах опромінення зразка всередині резонатора на резонансній частоті.

До того ж висновку приводить порівняння залежностей на рис.4: рівність коефіцієнтів нахилу апроксимуючих прямих свідчить про те, що ймовірно нетепловою дією ЕМХ ММД на воду за даних умов можна нехтувати.

Висновки

Оптичний безконтактний метод, що базується на існуванні залежності від температури інтенсивності флуоресценції водних розчинів органічних барвників, застосовано для визначення зміни температури води при поглинанні ЕМХ ММД.

За допомогою двох барвників з протилежними температурними ефектами виміряно нагрів водного розчину в капілярі, розміщеному в середині прямокутного хвилеводу.

При використанні навіть малопотужних джерел ЕМХ ММД локальне збільшення температури зразка може становити декілька градусів. Разом з тим, отримані результати вказують на відсутність нетеплового впливу міліметрових хвиль на воду.

Список використаних джерел

1. Devyatkov N.D., M.B.Golant. Millimeter waves and their role in life processes //Radio and Communications. -1991. (in Russian).
2. Iskin V.D.. The biological effects of millimeter waves and the correlation method of detection //Kharkiv, Osnova. -1990. (in Russian).
3. Lou J., Finegan M., Mohsen P. Florescence-based thermometry: principles and applications //Reviews in Analytical Chemistry. -1999. -18(4). -P.235-284.
4. Viznyuk S.A., Pashinin P.P. The effect of temperature combustion luminescence in water solution of rhodamine 6G //JETP Letters. -1988. -47(4). P.190-193. (in Russian).
5. Belyakov E.V.. High-Q resonance in a waveguide with a highly absorbing dielectric //Electronic Engineering. Ser.1., Microwave Electronics. -1987. -401 (7). -P.51-53. (in Russian).
6. Kiselev V.F., Saletskii A.M., Semikhina L.P. Influence of weak magnetic fields and UHF radiation on certain dielectric and optical properties of water and aqueous solutions //Theoretical and Experimental Chemistry. -1988. -24(3). -P.319-323.
7. Domnina N.A., Korolev A.F., Potapov A.V.. Influence of microwave radiation on the association processes of rhodamine 6G molecules in aqueous solutions //Journal of Applied Spectroscopy. -2005. -72(1). -P.33-36.

Надійшла до редколегії 12.09.2013

УДК 535.375.5: 621.373.826

Ящук В.П.¹, к.ф. - м.н., доц.,
Смалюк А.П.¹, аспірант

Енергетичні закономірності вимушеного комбінаційного розсіяння родаміна 6Ж в сильнорозсіювальному середовищі

Встановлені експериментальні енергетичні закономірності вимушеного комбінаційного розсіяння родаміна 6Ж в сильнорозсіювальних середовищах на прикладі везикулярних полімерних плівок. Показано, що ці закономірності узгоджуються із модельними уявленнями, відповідно до яких ВКР барвників в сильнорозсіювальних середовищах стимульоване двома випромінюваннями: накачування та хаотичної генерації.

Ключові слова: хаотичні середовища, багатократне розсіяння, хаотична генерація, вимушене комбінаційне розсіяння, везикулярні плівки.

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: yavasil@univ.kiev.ua

V.P. Yashchuk¹, PhD,
A.P. Smaliuk¹, PhD stud.

Energy regularities of stimulated Raman scattering of rhodamine 6G in a strongly scattering medium

The experimental energy behaviors of stimulated Raman scattering of rhodamine 6G in multiply scattering media were ascertained by example vesicular polymeric films. It is shown that these behaviors conform to the model assumption, according to which the SRS of dyes in the multiply scattering media is stimulated by both emissions: of pumping and random lasing.

Key words: random media, multiple scattering, random lasing, stimulated Raman scattering, vesicular films.

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: yavasil@univ.kiev.ua

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

Багатократне пружне розсіяння світла в дисперсних активних середовищах, подібно до резонатора звичайних лазерів, здатне утримувати в ньому випромінювання, сприяючи цим самим його підсиленню. За умов переваги підсилення над втратами, формується випромінювання з вузьким спектром, котре розповсюджується вздовж випадкових траєкторій та називається хаотичною генерацією (ХГ). Оскільки при багатократному розсіянні в дифузному режимі розповсюдження когерентність випромінювання порушується, спектр цього випромінювання неперервний (на відміну від звичайних лазерів).

В дисперсних середовищах, забарвлених органічними барвниками, при достатній інтенсивності накачування може проявлятися також вимушене комбінаційне розсіяння (ВКР) цих барвників. Процеси ВКР та ХГ протікають одночасно, формуючи квазілінійчатий спектр випромінювання. Виходячи із механізму

одночасного протікання цих явищ, в [1-3] знайдені залежності, якими повинно описуватися випромінювання ВКР в цих умовах. В зв'язку з цим виникає нагальна необхідність детальної експериментальної перевірки цих залежностей, і відповідно адекватності запропонованого механізму протікання ВКР органічних барвників в сильнорозсіювальних середовищах. Попередня перевірка була зроблена в [2] на прикладі ВКР барвника пірометена 597, в спектрі якого проявляється чітко лише одна стокова лінія. Однак для надійного підтвердження механізму явища потрібні більш широкі дослідження. Це важливо також для розуміння можливого застосування цього явища, зокрема для отримання спектроскопічної інформації.

Зразки та методика вимірювань

Для проведення таких досліджень використовувались везикулярні полімерні плівки, забарвлені родаміном 6Ж (Р6Ж). Центрами

розсіяння в цих плівках є щільно упаковані везикули азоту діаметром $1.2 \div 1.5$ мікрона [5], утворені в забарвленому полімері. Необхідне для виникнення ХГ ефективне світлорозсіяння в плівках створюється завдяки щільній упаковці, значному відносному показнику заломлення та повному внутрішньому відбиттю на границі везикул з полімером. ХГ та ВКР розвивається в проміжках між везикулами.

Основна увага була зосереджена на експериментальних дослідженнях впливу інтенсивності випромінювання накачування та ХГ на інтенсивність ліній ВКР. Дослідження проводились при гелієвих температурах, при яких лінії ВКР проявляються найбільш різко. Вибір барвника і його концентрації (3 мМ/л) був обумовлений тим, що при цих температурах в

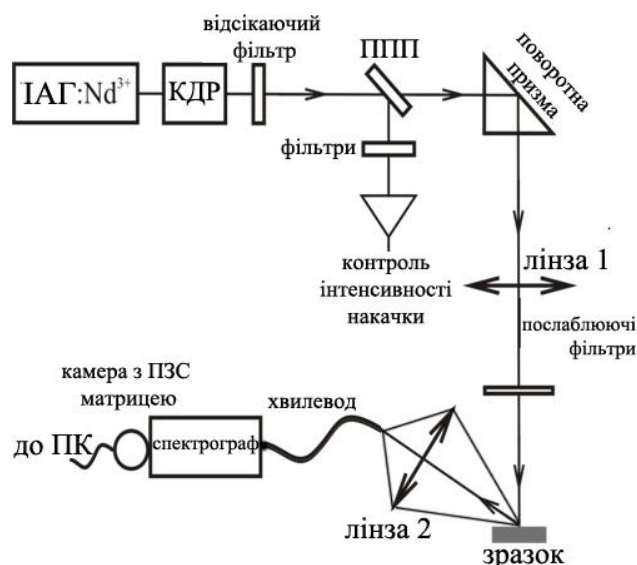


Рис. 1. Схема експериментальної установки для реєстрації спектрів хаотичної генерації та ВКР.

загальному спектрі ХГ-ВКР родаміну 6Ж спостерігається декілька добре виражених ліній, зручних для проведення таких досліджень. Крім того, зсув спектра ХГ при зміні температури дозволяв змінювати розташування ліній ВКР відносно цього спектра і, отже експериментальні умови їх спостереження.

На рис. 1. представлена схема експериментальної установки для реєстрації спектрів ХГ. Накачування здійснювалась другою гармонією (кристал КДР) лазера з модуляцією добротності на ІАГ:Nd³⁺ ($\lambda=532$ нм). Її інтенсивність на поверхні розміщеного в кріостаті зразка змінювалась фокусуванням (лінза 1) та послаблюючими сірими фільтрами в межах $0.1 \div 2$ МВт/мм². Діаметр пучка

накачування на поверхні зразка становив $\approx 0,7$ мм, що перевищувало типовий діаметр (0.2мм) області локалізації випромінювання ХГ в сильнорозсіювальному зразку [4]. Для контролю інтенсивності накачування частина лазерного пучка відгалужувалась плоско-паралельною пластинкою ППП в канал реєстрації, що складався із фотодіода (ФД-24К), пристрою вибірки-зберігання (ПВЗ) та цифрового вольтметра. Для проведення абсолютних вимірів канал реєстрації був прокалібрований за допомогою калориметричного вимірювача ИМО-2.

Випромінювання ХГ та ВКР спостерігалось в напрямі «назад», під кутом 135° до пучка накачування. Випромінювання зразка фокусувалось лінзою 2 на вхідне вікно світловода, через який направлялось на дифракційний спектрограф з ґраткою 1200шт/мм. Реєстрація спектра випромінювання ХГ здійснювалась за допомогою ПЗЗ матриці за один лазерний постріл із загальним спектральним розділенням 0.3 нм. Зображення спектра візуалізувалось на дисплеї комп'ютера і записувалось у файл. Зафіксоване зображення оброблялось за допомогою спеціальної комп'ютерної програми "Digitizer" і подавалось у вигляді залежності спектральної густини енергії випромінювання від довжини хвилі. За допомогою цієї ж програми лінійчата складова ВКР відділялась від суцільного спектра ХГ.

Основну похибку в експериментальні дані вносила процедура розділення складових, оскільки форма суцільної складової спектра сильно залежала від інтенсивності накачування і кожного разу була фактично іншою, а інтенсивність ХГ та ліній ВКР флуктувала внаслідок генераційної природи цих явищ. Тому для отримання надійних статистичних даних кожна енергетична залежність отримувалась шляхом обробки кількох десятків спектрів. Крім того, для усунення впливу можливої неоднорідності зразка спектри отримувались для кількох його ділянок, а отримані результати усереднювались.

Енергетичні залежності, що витікають із моделі ВКР

Енергетичні залежності, які доцільно піддати експериментальній перевірці, витікають із моделі ВКР в дисперсному середовищі, яка була сформульована в [1,2].

Відповідно до цієї моделі ХГ та ВКР протікають одночасно і, як вимушені процеси, стимулюють один одного через спільну інтенсивність випромінювання на частоті випромінювання стоксової лінії ω_L . Внаслідок цього приріст інтенсивності на цій частоті може бути описаний системою диференціальних рівнянь

$$\frac{dI_L}{dz} = g \cdot (\chi^{(3)}(\omega_L))^2 \cdot I_n \cdot I_g, \quad (1)$$

$$\frac{dI_c}{dz} = (\sigma(\omega_L) \cdot \Delta(I_n) - \alpha) \cdot I_g, \quad (2)$$

$$I_g = I_L + I_c, \quad (3)$$

де I_c та I_L – інтенсивність суцільної та лінійчатої складових загального вторинного випромінювання I_g (рис.2), які обумовлені відповідно ХГ та ВКР; $\sigma(\omega)$ – поперечник вимушеного випромінювання, Δ – густина інверсної заселеності рівнів молекули барвника, $\chi^{(3)}(\omega)$ – нелінійна сприйнятливості, що описує ВКР, α – коефіцієнт втрат випромінювання в зразку за рахунок неактивного поглинання та виходу розсіяного випромінювання за межі зразка, I_n – інтенсивність накачування.

Система (1-3) справедлива не тільки для стоксової, але й будь-якої частоти ω , оскільки при $\omega \neq \omega_L$ нелінійна сприйнятливості рівна нулю і рівняння (1) пропадає, а залишається лише (2), що описує вимушене випромінювання.

Розв'язок цієї системи дає спектр вторинного випромінювання, обумовленого вимушеним випромінюванням (ХГ) та ВКР.

$$I_g(\omega, I_n) = I_{\text{люм}}(\omega, I_n) \times \exp \left(\left(g(\chi^{(3)}(\omega))^2 \cdot I_n + \sigma(\omega) \cdot \Delta(I_n) - \alpha \right) \cdot l \right), \quad (4)$$

де $I_{\text{люм}}$ – інтенсивність люмінесценції – зародкового випромінювання із якого шляхом підсилення формується ХГ, g – коефіцієнт пропорційності, l – середній шлях випромінювання в зразку. Використовуючи (4) можна отримати залежності, доступні для експериментальної перевірки наведених вище модельних уявлень. Такими є залежності інтенсивності загального вторинного випромінювання I_g , її лінійчатої I_L та суцільної I_c складових на частоті стоксових ліній ω_L від інтенсивності накачування I_n та суцільної складової I_c : $I_g(I_n)$, $I_L(I_n)$ та $I_L(I_c)$.

Виходячи лише з математичних міркувань всі отримані із (4) представлення рівнозначні цьому виразу. Однак, враховуючи експериментальні умови, такі як відмінність дисперсії розподілу випадкових значень вимірюваних величин і різну їх вагу, ці представлення нерівнозначні з точки зору можливості порівняння з реальними експериментальними залежностями. Тому серед цих представлень слід знайти таке, по якому, не зважаючи на розкид експериментальних точок,

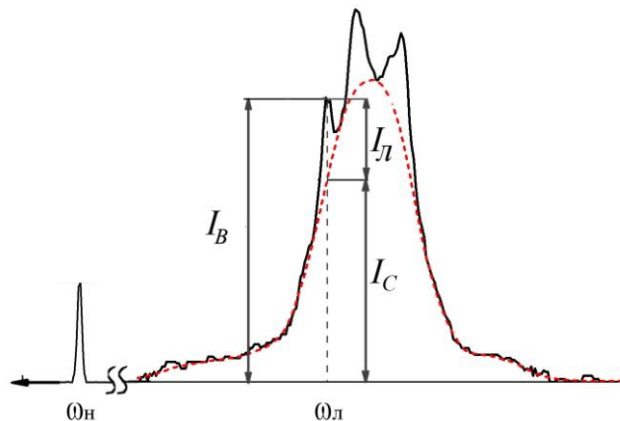


Рис.2. Схематичне зображення сумарного спектра $I_g(\omega)$ вторинного випромінювання органічного барвника в сильнорозсіювальному середовищі та його складових $I_c(\omega)$, $I_L(\omega)$.

можна було б однозначно стверджувати про наявність або відсутність відповідності теоретичних і експериментальних залежностей і тим самим підтвердити або спростувати зазначені модельні уявлення. Причому для полегшення порівняння бажано подати ці представлення в лінеаризованих координатах.

Враховуючи, що інтенсивність суцільної складової (випромінювання ХГ) в дифузному режимі розповсюдження випромінювання є підсиленою люмінесценцією

$$I_c(\omega, I_n) = I_{\text{люм}}(\omega, I_n) \cdot \exp(\sigma(\omega) \cdot \Delta(I_n)), \quad (5)$$

знаходимо інтенсивність лінійчатої складової $I_L = I_g - I_c$:

$$I_L(\omega_L, I_n) = I_c(\omega_L, I_n) \times (\exp(g \cdot \chi^{(3)}(\omega_L) \cdot I_n) - 1). \quad (6)$$

Таким чином із (6) в напівлогарифмічному масштабі маємо:

$$\ln\left(\frac{I_l}{I_c} + 1\right) = g \cdot \chi^{(3)}(\omega_l) I_n \cdot l \quad (7)$$

Тобто в загальному випадку лінійна залежність між I_l , I_c та I_n повинна спостерігатись в координатах $\{\ln(I_l/I_c + 1), I_n\}$.

При слабкому ВКР підсиленні ($I_l \ll I_c$), скориставшись наближенням $\ln(1+x) \approx x$, отримаємо лінійні залежності, що в подвійному логарифмічному масштабі мають вигляд:

$$\ln(I_l / I_n) = \ln I_c + \ln(g \cdot \chi^{(3)}(\omega_l) \cdot l) \quad (8a)$$

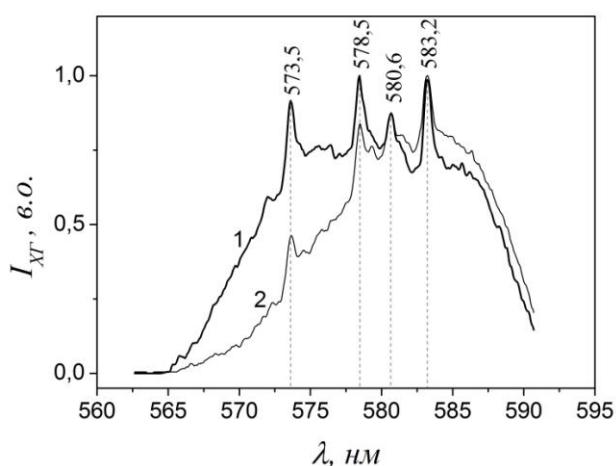


Рис. 3. Спектри сумарного випромінювання хаотичної генерації та ВКР Р6Ж в везикулярній плівці при інтенсивності накачування $I_n = 1.4 \text{ МВт/мм}^2$ і температурах $T=20\text{К}$ (1) і 9К (2).

$$\ln(I_l / I_c) = \ln I_n + \ln(g \cdot \chi^{(3)}(\omega_l) \cdot l) \quad (8б)$$

При великому підсиленні ($I_l/I_c \gg 1$) маємо:

$$\ln(I_l / I_c) = g \cdot \chi^{(3)}(\omega_l) \cdot I_n \cdot l \quad (9)$$

Залежності (7 - 9) є різними представленнями загального виразу (6), які, при виконанні зазначених умов, є однаково придатними для експериментальної перевірки: в них прямо пропорційний зв'язок величин I_l/I_n і I_c та I_l/I_c і I_n легко встановити по тангенсу кута нахилу відповідної прямої в подвійному (8) та одинарному (7, 9) логарифмічному масштабі.

Експериментальна перевірка аналітичних енергетичних залежностей для ВКР.

Експериментальна перевірка наведених аналітичних залежностей проведена для везикулярної полімерної плівки з максимально

можливим розсіянням, забарвленої родаміном 6Ж з концентрацією барвника $3 \cdot 10^{-3} \text{ М/л}$.

На рис. 3 наведені спектри сумарного вторинного випромінювання цієї плівки при двох температурах, близьких до температури рідкого гелію. В наведених спектрах проявляються 4 лінії ($\lambda_1 = 573,5$, $\lambda_2 = 578,5$, $\lambda_3 = 580,6$ та $\lambda_4 = 583,2$ нм) достатньої інтенсивності, що дозволяє впевнено зареєструвати згадані енергетичні залежності. Положення цих ліній відносно спектра ХГ залежить від температури, що дає можливість перевірити згадані залежності при різних умовах їх спостереження.

Перевірка залежності $\ln(I_l/I_c + 1)$ від I_n для кожної з чотирьох смуг показало, що таке представлення є невдалим для проведення експериментальної перевірки внаслідок значної дисперсії значень I_l та I_c (рис. 4), що обумовлено генераційною природою обох параметрів. Оскільки їх величини обумовлені підсиленням (відповідно внаслідок вимушеного розсіяння та вимушеного випромінювання), то будь-які флуктуації, які впливають на це підсилення призводять в підсумку до значних флуктуацій цих величин, які, накладаючись, призводять до великого розкиду відношення I_l/I_c . Цей розкид маскує очікувану лінійну залежність $\ln(I_l/I_c + 1)$ від I_n , яка хоч і простежується для більшості ліній і температур, але не може бути встановлена достатньо надійно.

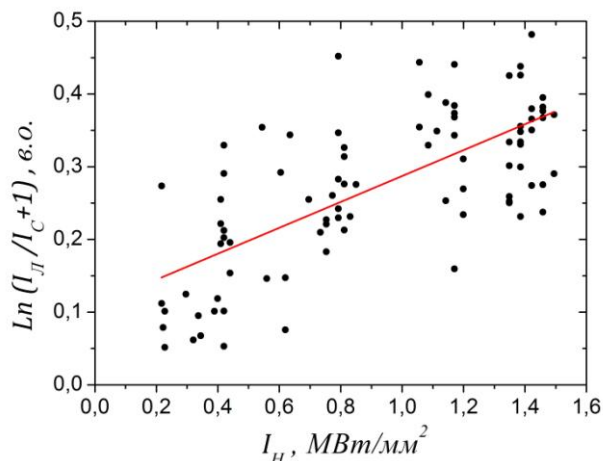


Рис. 4. Експериментальна залежність $\ln[I_l/I_c + 1]$ від інтенсивності накачки I_n для лінії $\lambda_1 = 573,5$ нм при температурі $T = 9 \text{ К}$.

Свідченням цього є різний нахил апроксимуючої прямої для різних ліній і температур, що протирічить модельним уявленням. Внаслідок великого розкиду даних всі ці зміни слід віднести до похибки лінійної апроксимації, а не до протиріччя із моделлю.

Подібна ситуація спостерігається і для представлення $I_{\lambda}/I_c = f(I_n)$ в лінійному та подвійному логарифмічному масштабі. Як і попереднє представлення, ця залежність в

перевищує 5%. Менш надійно - для слабкої лінії λ_1 , відхилення для якої становить 20%.

Відповідно до формул (8-9) інтенсивність лінії ВКР залежить не тільки від інтенсивності

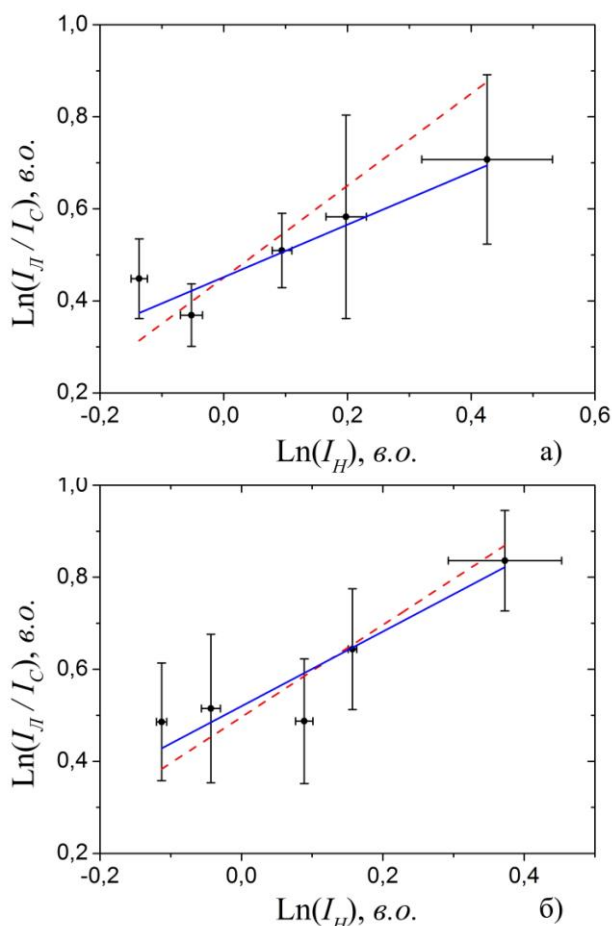


Рис. 5. Експериментальна (точки) та апроксимуюча (суцільна лінія) залежності I_{λ}/I_c від I_n для лінії $\lambda_2 = 578,5$ нм при температурі: а) $T = 9$ К та б) $T = 20$ К; пунктир – лінійна з одиничним кутовим коефіцієнтом.

подвійному логарифмічному масштабі $\ln(I_{\lambda}/I_c) = f(\ln I_n)$ сильно зашумлена і лінійна залежність апроксимується достатньо грубо (рис.5).

Лінійна апроксимація значно покращується в представленні I_{λ}/I_n від I_c в подвійному логарифмічному масштабі. Вона чітко проявляється для всіх без винятку ліній і температур і може бути проведена достатньо впевнено (рис.6). При цьому тангенс кута нахилу залежності близький до одиниці, що узгоджується із теоретичною залежністю (8а).

Надійність лінійної апроксимації з одиничним кутовим нахилом залежить від інтенсивності лінії. Найбільш надійно вона встановлюється для найбільш інтенсивної лінії λ_4 (при $T = 9$ К) – відхилення тангенса кута нахилу від одиниці не

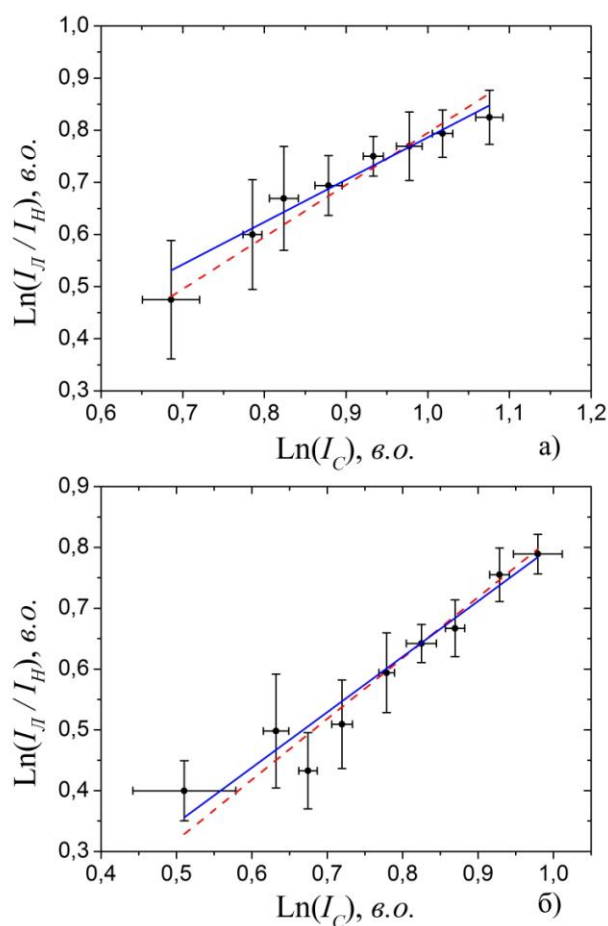


Рис. 6. Експериментальна (точки) та апроксимуюча (суцільна лінія) залежності I_{λ}/I_n від I_c при температурі $T = 9$ К для ліній $\lambda_2 = 578,5$ (а), та $\lambda_4 = 583,2$ (б) нм; пунктир – лінія з одиничним кутовим коефіцієнтом.

накачування I_n , але й інтенсивності ХГ на частоті цієї лінії I_c , яка в свою чергу сама досить складно залежить від I_n внаслідок зміщення спектра ХГ. А саме: при збільшенні I_n спектр ХГ зміщується в довгохвильову сторону, що призводить до його сповзання з короткохвильової лінії λ_1 . В результаті, ця лінія при збільшенні накачування не тільки не зростає, а навіть зменшується, що призводить до зростання похибок визначення її інтенсивності. Внаслідок цього лінійні залежності (8) для найбільш короткохвильової лінії $\lambda_1 = 573,5$ нм проявляються значно гірше ніж для трьох інших. Через те, висновки про відповідність експериментальної залежностей $\ln(I_{\lambda}/I_n) = f(\ln I_c)$ виразу (8а) для різних ліній слід приймати з врахуванням довірчої ймовірності,

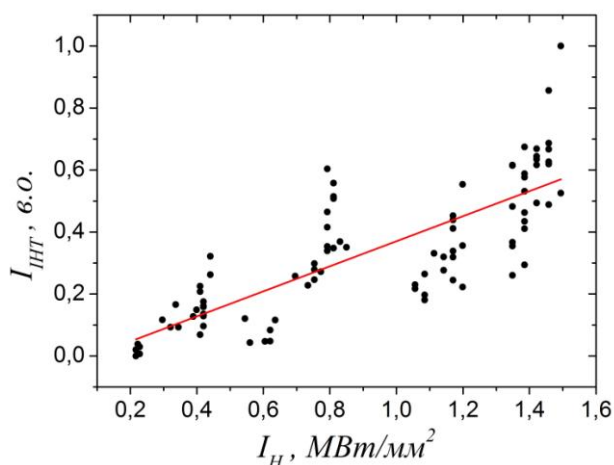


Рис. 7. Залежність інтегральної по спектру інтенсивності I_{int} випромінювання барвника від I_H при температурі зразка $T = 9\text{K}$.

яка обернено пропорційна до дисперсії відповідних даних. Враховуючи ці міркування, можна стверджувати, що експериментальна залежність $I_H/I_c = f(I_c)$ є лінійною і, отже, підтверджує прийняті модельні уявлення, відповідно до яких ВКР в сильнорозсіювальних середовищах стимулюється двома випромінюваннями: накачкою і ХГ.

В представленні $\text{Ln}(I_H/I_c) = f(I_H)$, що відповідає виразу (9) чітко простежується виключно нелінійна залежність. Це цілком закономірно, оскільки це представлення справедливе лише для сильних ліній $I_H/I_c \gg 1$, що не відповідає реальним даним навіть для найбільш інтенсивних ліній ВКР. Таким чином, виходячи із експериментальних умов, найбільш придатними для експериментальної перевірки є представлення $\text{Ln}(I_H/I_c) = f(\text{Ln} I_c)$, яке відповідає виразу (8а).

Із збільшенням інтенсивності накачування до досить високих значень $\sim 1\text{ MBm/mm}^2$ в зразку можуть виникати незворотні деструктивні процеси (підгорання плівки, руйнування барвника, тощо) або виникати нелінійне поглинання за рахунок переходів між збудженими рівнями молекул барвника. Це призводить до зменшення енергії накачування, реально затраченої на збудження молекул барвника, актуальної для ХГ та ВКР. Оскільки корисно затрачену частину енергії накачування важко встановити, то це може призвести до спотворення експериментальних енергетичних залежностей і вплинути на висновки про адекватність моделі ВКР.

Відсутність такого впливу можна встановити по залежності інтегральної по спектру інтенсивності I_{int} сумарного випромінювання ХГ

та ВКР від I_H , яка повинна бути лінійною. Із рис.7 видно, що це підтверджується з хорошою точністю. Це свідчить про те, що практично вся енергія накачування у всьому діапазоні її зміни йде на вимушене випромінювання ХГ та ВКР і, отже, відсутнього впливу незворотних процесів не спостерігається.

Висновки

Наведені енергетичні залежності підтверджують уявлення про ВКР в сильнорозсіювальних активних середовищах як процес стимульований двома випромінюваннями: накачування та хаотичної генерації, що виникає під її дією.

Експериментальна залежність $I_H/I_c = f(I_c)$ близька до лінійної, що відповідає модельним уявленням. Лінійний характер залежностей між інтенсивностями I_L , I_H та I_c в інших представленнях $\text{Ln}(I_H/I_c) = f(\text{Ln} I_H)$ та $\text{Ln}(I_H/I_c + 1) = f(I_H)$, що витікають із моделі, встановити важче із-за значної дисперсії відношення I_H/I_c обумовленої генераційною природою цих параметрів.

Список використаних джерел

1. Yashchuk V. P., Tikhonov E.A., Prygodiuk O.A.. Effect of stimulated raman scattering on the formation of the random lasing spectrum of dyes // JETP Letters, **91**.№ 4,174-177 (2010).
2. Yashchuk V. P., Tikhonov E.A., Prygodiuk O.A.. // Mol. Cryst. Liq. Cryst, **535**, 156-166 (2011).
3. Yashchuk V.P., Tikhonov E.A., Bukatar A.O., Prigodiuk O.A., Smaliuk A.P., Stimulated resonance Raman scattering from organic dyes in a multiple-scattering medium as a potential method for determining their vibrational spectra // Quantum electronics, **41** (10), 875-880 (2011).
4. Yashchuk V.P., Zhuravskiy M.V., Prigodiuk O.A.. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. **70**, №9. C.1318-1322 (2006).
5. Yashchuk Vasil P., Tikhonov E., Prygodjuk O., Koreniuk V., Paskal L. Lasing of 2D short-range photonic crystals made of dyed vesicular polymer // Proc. of SPIE, **6728**, 67280N1-67280N7 (2007).

Надійшла до редколегії 30.09.13

Підписано до друку _____. Формат _____. Друк. офс.
Папір офс. № _____. Друк. арк. _____. Тираж _____. Зам. _____.
Друкарня _____.