КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

В І С Н И К

КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

СЕРІЯ ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК №3 2014

**Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка,
випуск №3, 2014,
Серія фізико-математичні науки**

З 1991 року серії вісників Київського університету “Математика і механіка”, “Физика”, “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 ВИНИТИ, Росія, Москвва.

Редакційна колегія:

Анісімов Анатолій Васильович, чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф., **головний редактор**;

Хусаінов Денис Яхьєвич, д.ф.-м.н., проф., **заступник головного редактора, відповідальний за видання**;

Arturs Medvids, Dr. habil. Phys., prof., Riga Technical University, Riga, Latvia;

Miklós Rontó, prof., Doctor of Science, Full Professor at the University of Miskolc, Faculty of Mechanical Engineering and Information Science, Department of Analysis;

Milada Bartlova, Ph.D., Brno University of Technology, Department of Physics, Brno, Czech Republic;

Nickolai Kukhtarev, Research professor, Department of Physics, Alabama A&M University;

Sergei Gorlatch, Dr. habil., prof., professor of Computing Science, University of Muenster, Germany;

Sergey Trofimchuk, prof., Universidadde Talca, Instituto de Matematica y Fisica, Talca, Chile;

Stefan Hudak, DSc, prof., professor of Technical University of Kosice, Slovak Republic;

Toru Aoki, Ph.D., prof., Research Institute of Electronics, Shizuoka University, Japan;

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.;

Гаращенко Федір Георгійович, д.т.н., проф.;

Єжов Станіслав Миколайович, д.ф.-м.н., проф.;

Жук Ярослав Олександрович, 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.;

Львов Віктор Анатолійович, 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.;

Перестюк Микола Олексійович, акад. НАН України, д.ф.-м.н., проф.;

Погорілий Сергій Дем’янович, д.т.н., проф.;

Савенков Сергій Миколайович, д.ф.-м.н., доц.;

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

Ганиченко Ю.В. Оцінка точності методу моделювання Монте-Карло розв'язку одного параболічного рівняння з сингулярним коефіцієнтом 9

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Асроров Ф.А. Збурення інтегральної множини нелінійної системи з імпульсним впливом 17
Багно О.М. Поширення хвиль у попередньо деформованому стисливому пружному шарі, який взаємодіє з шаром ідеальної стисливої рідини 22
Вовк І.В., Маципура В.Т., Трунов О.О. Поширення хвилі у криволінійному хвилеводі з різкою зміною ширини вигину 28
Вовк І.В., Маципура В.Т., Трунова Л.А. Точкове джерело в околі хрестоподібного відбивача 32
Задоянчук Н.В. Розв'язність одного класу задач оптимального керування для виродженої параболічної варіаційної нерівності 36
Назаренко В.М., Кіпніс О.Л. Концентрація напружень біля кутової точки межі поділу середовищ у кусково однорідній площині за наявності тріщини 42
Кудзіновська І.П., Лимарченко О.С., Мелник В.М. Параметричні коливання рідини з вільною поверхнею в резервуарі конічної форми 46
Лимарченко О.С., Семенович К.О. Поверхневе хвилеутворення в системі резервуар – рідина при кутовому збуренні руху резервуару 50
Лимарченко О.С., Тімохін О.П. Аналіз впливу сил Коріоліса і нелінійностей на динаміку трубопроводу 54
Острик В.І., Улітко А.Ф. Ковзний контакт з довантаженням двох штампів і пружної півплощини 58
Прощенко Т.М. Про крайові задачі трансверсально-ізотропних пластин прикладної теорії типу Тимошенка 62
Ткаченко Р.В., Лимарченко О.С. Коливання вільної поверхні рідини в резервуарі на рухомій платформі при вібраційному навантаженні 65

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Адамчук-Чала Н.І., Яценко В.О., Гніденко В.В., Пашенковська І.С. Рослини в космосі: виміри, моделювання та експерименти 71
Брила А.Ю., Антосяк П.П.Досяжність нечітких цілей у заданій субординації строгого ранжування 76
Гаращенко Ф.Г., Кручинін Д.С.Про чисельні дослідження динаміки пучка в електрофізичних установ 81
Глебена М.І. Чисельний метод оптимізації логарифмічно увігнутих функцій двох дійсних змінних 88
Глушко І.М. Узагальнення теорем Кодда-Лакруа-Піротта 92
Даниленко Д. А. Оптимізація еліптичних кривих 98
Донченко В.С., Скотаренко Ф.М. Кортежні оператори в задачі групування інформації: лінійна дискримінація матричних 'векторів ознак' 101
Завадський І.О. Комбінаторний алгоритм підвищення завадостійкості кодів, що генеруються скінченними автоматами 105
Зуб С.С., Зуб С.І. Рівняння гамільтонової динаміки твердого тіла в кватерніонних змінних. Магнітний диполь в зовнішньому полі 111
Івохін Є.В. Про нечітке представлення дійсних чисел у формі триплетів 118
Івохін Є.В., Аджубей Л.Т. Про розв'язок однієї дворівневої моделі виробничо-транспортної задачі 122
Какойченко А.І. Особливості використання стратегії статистичного арбітражу 126
Капустян О.А., Мазур О.К. Наближене оптимальне керування для рівняння Пуассона з нелокальними крайовими умовами 130
Клюшин Д.А., Голубєва К.М. Методи розпізнавання контурів зображень ядер клітин 135
Ковальов Д.І. Методи адаптивної оцінки у системах електронного навчання 141
Компан С.В. Типізація сучасних баз даних (огляд) 144
Конюшенко О. В. Реалізація системи персоналізованого пошуку на основі аналізу діяльності членів віртуальної спільноти 154

Назаренко О. М., Карпуша М. В. Дискретно-неперервні моделі в багатокритеріальних задачах оптимізації з лінійним і квадратичним критеріями якості 160
Нікітченко М.С., Криволап А.В.Композиція побудови умови за прообразом у монотонних логіках Флойда-Хоара 166
Савкіна М. Ю. Оцінювання параметрів лінійної регресійної моделі неповного рангу 172
Семенова Н. В., Олійник С. В Декомпозиційний метод розв'язання задач частково комбінаторної оптимізації 176
Скобєлєв В.Г. Про структуру множини усіх скінченно-породжуваних напівгруп спеціальних унітарних операторів у просторі C^2 182
Тмєнова Н.П., Сусь Б.Б. Алгоритм комп'ютерного тестування математичних завдань в віртуальних начальних середовищах 188
Шабелюк О. В. Система мобільного навчання фізичним дисциплінам (на прикладі лабораторного практикуму з оптики) 192
Шкільняк С. С., Волковицький Д. Б. Реномінативні композиційно-номінативні логіки з предикатами рівності 198
Шушарін Ю. В. Рекурентні рівняння для характеристичних функцій розв'язків лінійних різницевих рівнянь з випадковими коефіцієнтами 206
Яковенко О.А., Кудін В.І. Про інструментарії аналізу властивостей лінійних моделей у пакетах математичного програмування 210

РАДІОФІЗИКА

Гандзюк В.І. Павлюк С.П., Оберемок О.С. Вплив польового розігріву на інжекційні ефекти в кремнієвих n^+-n-n^+ структурах 219
Глушенков А.М., Говорун Д.М. Конформаційне різноманіття пар основ ДНК $m^9Gua \cdot m^1Thy$: квантово-механічне дослідження 225
Горячко А.М. Наноструктуризація графену на поверхні 4H-SiC(0001) 231
Карлаш А.Ю. Еволюція кінетики фотолюмінесценції в композитних зразках $arSiO_x$/ nc-Si в процесі старіння 235
Кулик С.П. Формування тонкої плівки хрому на поверхні Si(001) 239

СУЧАСНА ФІЗИКА

Атамась Н.О., Васильєва Д.Д. Вплив концентрації на енергетичні та структурні властивості водного розчину NaBr при T=300K 245
Власенко Т.С., Сисоєв В.М. Вплив зовнішніх факторів на структуру двокомпонентної системи в стаціонарному стані 249
Горбар Е.В Аксіальний струм в моделі Намбу-Йона-Лазініо у зовнішньому магнітному полі 253
Забашта Ю.Ф., Орел В.Е., Вергун Л.Ю., Загородня О.А., Свечнікова О.С. Метод дослідження властивостей колагеноподібних пептидів, що застосовуються в сучасних медичних технологіях 255
Кондратенко С. В. Вплив флуктуацій розмірів складу на люмінесцентні властивості ансамблю нанооб'єктів InGaAs 259
Кутовий С. Ю., Савчук Р. С., Башмакова Н. В. Параметри зв'язування алкалоїду сангвінарину з ДНК 265
Кутовий С. Ю., Сич Т.П., Заїка Л.А. Особливості зв'язування бромистого етидію та акридинового оранжевого з ДНК 273
Пророк В.В., Вайт Ф.Дж, Даценко О.І., Булавін Л.А., Мельниченко Л.Ю., Поперенко Л.В. Канали надходження калію та цезію-137 до редису у природних умовах при недостатній вологості грунту 279
Храпатий С. В., Махлайчук В. М. Визначення ступеню димеризації водяної пари за допомогою спектроскопічного методу 283
Ящук В.П., Комишан О.О., Сиромятников В.Г., Ольховик Л.А. Вимушене комбінаційне розсіяння суміші барвників пірометена 597 і родаміна 6Ж у везикулярних полімерних плівках 287
Ящук В.М.,Терентьєва Ю.Г.,Штонь І.М.,Коваль Ю.В.,Сніцерова О.М.,,Гамалія М.Ф. Особливості УФ-спектрів поглинання лімфоцитів 291

CONTENTS

ALGEBRA, GEOMETRY AND PROBABILITY THEORY

Ganychenko Iu.V. The accuracy estimation of Monte-Carlo method for the solution to one singular parabolic equation 9

DIFFERENTIAL EQUATIONS, MATHEMATICAL PHYSICS AND MECHANICS

Asrorov F.A. The perturbation of integral set of nonlinear impulsive system 17
Bagno O.M. Propagation of waves in a predeformed compressible elastic layer that interacts with a layer of an ideal compressible liquid 22
Vovk I. V. , Matsipura V. T. , Trunov O. O. The wave propagation in waveguide with thickened bend 28
Vovk I. V. , Matsipura V. T. , Trunova L.A. Point source in the vicinity of the cross-shaped reflector 32
Zadoianchuk N.V. The solvability of one class of optimal control problem for degenerate parabolic variation inequality 36
Nazarenko V.M., Kipnis A.L. Stress concentration near the corner point of interface in piece-homogeneous plane with a crack 42
Kudzinovs'ka I.P., Limarchenko O.S., Melnik V.N. Parametric oscillations of liquid with a free surface in reservoir of conic shape 46
Limarchenko O.S., Semenovych K.O. Surface sloshing in the system reservoir–liquid for the case of angular excitation of reservoir motion 50
Limarchenko O.S., Timokhin O.P. Analysis of the Coriolis force and nonlinearities effect on dynamics of pipeline 54
Ostryk V.I., Ulitko A.F. Sliding contact with added stresses of two stamps and elastic half-plane 58
Proshchenko T.M. About the boundary value problems transversely - isotropic plates of applied theory of Timoshenko type 62
Tkachenko R., Limarchenko O.S. Oscillation of a free surface of liquid in reservoir on moving platform under vibration loading 65

COMPUTER SCIENCES AND INFORMATIC

Adamchuk-Chala N.I., Yatsenko V.O., Gnidenko V.V., Pashenkovska I.S. Plants in space: measurements, modeling and experiments 71
Brila A.Yu., Antosyak P.P. Attainability of fuzzy goals in a defined subordination of strict ranking 76
Garaschenko F.G., Kruchynin D.S. On numerical studies of the dynamics of a beam in electrophysical installations 81
Hlebena M.I. Numerical method of optimization of logarithmically concave functions of two real variables 88
Glushko I.M. Generalization of Codd-Lacroix-Pirotte's theorems 92
Danylenko D. Optimization of elliptic curves 98
Donchenko V.S., Skotarenko F.M. Cortege Operators in Grouping Information Problem: Linear Discrimination of Matrix 'Feature Vectors' 101
Zavadskyi I.O. Search algorithm for increase the performance of codes generated by finite automatons 105
Zub S.S., Zub S.I. Hamiltonian equation of a rigid body dynamics in quaternion variable. The magnetic dipole in an external field 111
Ivohin E.V. About fuzzy real numbers presentation in triplet form 118
Ivohin E.V., Adzhubey L.T. About solution of one two-level production-transportation problem 122
Kakoichenko A.I. Features of statistical arbitrage strategy 126
Kapustian O.A., Mazur O.K. Approximate optimal control for Poisson equation with nonlocal boundary conditions 130
Klyushin D.A., Golubeva K.M. Methods of contour extraction in images of cell nuclei 135
Kovaliov D.I. Fuzzy assessment methods in e-learning system 141
Kompan S.V. Typification of modern databases (review) 144
Konyushenko O.V. Implementation of personalized search system based on the analysis of the activity of the members of the virtual community 154
Nazarenko O.M., Karpusha M.V. Discrete-continuous Model in Multicriteria Optimization Problem with Linear and Quadratic Quality Criterias 160
Nikitchenko M.S., Kryvolap A.V. Composition of preimage condition construction in monotone Floyd-Hoare logics 166

Savkina M.Yu. Estimation of parameters of linear regression model of incomplete grade 172
Semenova N. V., Oliinyk S.V. Decomposition Method for solving of mixed combinatorial problems 176
Skobelev V.G. On the structure of the set of all finitely generated semigroups of special unitary operators in the space C^2 182
Tmyenova N.P., Suse B.B. Computer-based testing algorithm of mathematical expressions in virtual e-learning systems 188
Shabeliuk O.V. Mobile learning system of physical disciplines (on example laboratory work of optics) 192
Shkilniak S.S., Volkovytskyi D.B. Renominative composition-nominative logics with predicates of equality 198
Shusharin Y.V. Recurrent equation for characteristic functions solutions of linear difference equations with random coefficients 206
Iakovenko O., Kudin V. About existing linear models properties analysis tools in mathematical software packages 210

RADIOPHYSICS

Handziuk V.I., Pavljuk S.P., Oberemok O.S. The influence of field heating on injection effects in silicon n^+-n-n^+ structures 219
Glushenkov A.N., stud., Hovorun D.N. Conformational diversity of m^9Gua·m^1Thy DNA base pairs: quantum-mechanical study 225
Goriachko A.M. Nanostructuring of graphene on the 4H-SiC(0001) substrate 231
Karlash A.Yu. The evolution of PL relaxation processes under aging of arSiO_x/ nc-Si nanocomposites 235
Kulyk S.P. The thin film of chromium formation on Si (001) surface 239

MODERN PHYSICS

Atamas N.O., Vasylieva D.D. Effect of concentration on energetics and structural properties of aqueous solution of NaBr at T = 300 K 245
Vlasenko T.S., Sysoev V.M. Influence of external factors on the two-component system structure in the steady state. 249
Gorbar E.V. Axial current in dense Nambu-Jona-Lasinio model in a magnetic field 253
Zabashta Yu.F., Orel V.E., Vergun L.Yu., Zagorodnya O.A., Svechnikova O.S. Method for the study of properties of collagen-type peptides used in modern medical technology 255
Kondratenko S. V. Effect of size and composition fluctuations on the luminescent properties of ensemble of InGaAs nanoobjects 259
Kutovyy S., Savchuk R., Bashmakova N. Binding parameters of sanguinarine to DNA 265
Kutovyy S., Sych T., Zaika L. Peculiarities of ethidium bromide and acridine orange binding to DNA 273
Prorok V. V., White P. J., Dacenko O. I.,. Bulavin L. A,. Melnychenko L. Yu, Poperenko L. V. Mechanisms of potassium and cesium-137 uptake by radish in the field under water-stressed conditions 279
Khrapatiy S. V., Makhlaichuk V. M. Determination of the degree of dimerization of water vapor according to the spectroscopic data 283
Yashchuk V.P. , Komyshan O.O., Syromiatnikov V.G., Olkhovyk L.A. Stimulated Raman scattering of pyrromethene 597 and rhodamine 6G mixture in vesicular polimeric films 287
Yashchuk V.M., Terent'yeva J.G., Shton I.M,. Koval J.V., Snitserova O.M., CamaliyaM.F. Some peculiarities of the lymphocytes UV-absorption spectra. 291

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

УДК 519.21

Ю.В. Ганиченко[1], аспірант

Оцінка точності методу моделювання Монте-Карло розв'язку одного параболічного рівняння з сингулярним коефіцієнтом

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова, 4е,
e-mail: iurii_ganychenko@ukr.net

Iu.V. Ganychenko[1], PhD Student

On accuracy of a Monte-Carlo simulation method for the solution to a parabolic equation with singular coefficients

[1]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4e,
e-mail: iurii_ganychenko@ukr.net

У даній статті ми наводимо практичне застосування попередніх теоретичних результатів про оцінки точності методу моделювання Монте-Карло розв'язків параболічного рівняння з сингулярними коефіцієнтами, ілюструючи вплив сингулярного коефіцієнта на розв'язок задачі Коші. Один із результатів забезпечує теоретичну можливість застосування такого методу. Інший дає оцінку точності наближення W-функціоналу різницевими адитивними функціоналами. Попередні результати залишають відкритим питання оцінки точності методу моделювання Монте-Карло, що і розв'язується в даній роботі. Аргументами функціоналів являються багатовимірна дифузія та її відповідні різницеві апроксимації.

Ключові слова: метод Монте-Карло, адитивний функціонал, W-міра, дифузійний процес, швидкість збіжності.

In the current paper we give an application of previously obtained theoretical results on accuracy of a Monte-Carlo simulation method for the solution to a parabolic equation with singular coefficients, and illustrate the influence of the singular coefficient on the solution to the Cauchy problem. The first basic result gives a theoretical opportunity to apply the Monte-Carlo method for the numerical solution to the Cauchy problem, the other one provides an explicit rate of approximation of a W-functional by difference additive functionals. These results do not resolve the question about explicit accuracy bounds of a Monte-Carlo simulation method, which is addressed in the current paper. The multidimensional diffusion and its correspondent difference approximations are used as the arguments of the functionals.

Key Words: Monte-Carlo method, additive functional, W-measure, diffusion process, convergence rate.

Communicated by Prof. Kozachenko Yu.V.

Introduction

In the current paper we consider the following Cauchy problem for the second order parabolic PDE:

$$u'_t(t,x) = \sum_{i=1}^{m} a_i \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} u(t,x) +$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} \sigma_{ij} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} u(t,x) - \frac{d\mu}{d\lambda^m}(x) u(t,x), \quad (1)$$

$$u(0,x) = g(x),\ t \in \mathbb{R}^+,\ x \in \mathbb{R}^m,\ m \geq 2.$$

Here and below λ^m is a Lebesgue measure on $\mathbb{R}^m$, μ is a W-measure (see Definition 2.1), W is a Wiener process valued in $\mathbb{R}^m$, $g(\cdot)$ is a Lipschitz bounded function, $\sigma \equiv (\sigma_{ij})_{i,j=1}^m = bb^*$, and vector a and matrix b are respectively the drift and diffusion coefficients of the multidimensional diffusion process X valued in $\mathbb{R}^m$, $m \geq 2$. The process $X(t)$, $t \in \mathbb{R}^+$, is defined by the following equality:

$$X(t) = X(0) + \int_0^t a(X(s))ds + \int_0^t b(X(s))dW(s) \quad (2)$$

with its generator given by:

$$\mathcal{A} = \sum_{i=1}^{m} a_i \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} \sigma_{ij} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}. \quad (3)$$

Generally speaking, W-measure μ is not absolutely continuous w.r.t. λ^m and $\frac{d\mu}{d\lambda^m}$ is a

© Ю.В. Ганиченко, 2014

generalized function. That is why the equation (1) should be interpreted in the generalized sense. It is natural to call this equation a singular one. There exists one-to-one correspondence between W-measures and so called W-functionals (see Definition 2.2): each W-functional φ is represented in the form (see [4]):

$$\varphi^{s,t} = \int_s^t \frac{d\mu}{d\lambda^m}(X(r))dr,\ 0 \le s \le t.$$

Such functional φ is called the local time of the process X corresponding to the measure μ. By the W-functional φ one can construct the sub-process X^φ with the transition probability given by

$$\begin{aligned} &P[X^\varphi(t) \in \Gamma | X^\varphi(0) = x] \\ &= E[\mathbb{I}_\Gamma(X(t)) \cdot \exp(-\varphi^{0,t}) | X(0) = x], \end{aligned} \tag{4}$$

where $t \in \mathbb{R}^+,\ x \in \mathbb{R}^m,\ \Gamma \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^m)$ (see [3], §6 of Introduction).

Under some conditions (see $A6$) in the Theorem 1 of the next section), the Feynman-Kac formula gives the generator of the process X^φ at the form $\mathcal{A}^\varphi f = \mathcal{A}f - \frac{d\mu}{d\lambda^m} \cdot f$ (see [1], §1.2). That is, for any Lipschitz bounded function $g(\cdot)$ the solution to (1) has the following probabilistic representation:

$$u(t,x) = E[g(X(t)) \cdot \exp(-\varphi^{0,t}) | X(0) = x]. \tag{5}$$

The main result of [4] (Theorem 2.1) gives the sufficient conditions for the sequence of the joint distributions of (φ_n, X_n), conditioned by $X_n(0) = x$, to converge weekly to the joint distribution of (φ, X), conditioned by $X(0) = x$. As the corollary of such result,

$$u_n(t,x) \to u(t,x),\ n \to \infty,\ t \in \mathbb{R}^+,\ x \in \mathbb{R}^m,$$

where

$$u_n(t,x) = E[g(X_n(t)) \cdot \exp(-\varphi_n^{0,t}) | X_n(0) = x], \tag{6}$$

where the sequence $\{X_n,\ n \ge 1\}$ provides the difference approximations of the diffusion process (2) (see (7)–(8)), and $\{\varphi_n^{s,t},\ 0 \le s \le t,\ n \ge 1\}$ is the sequence of the non-negative additive functionals defined in (9).

Thus, the result of [4] gives a theoretical opportunity to apply, in a standard way, the Monte-Carlo method for the numerical solution to the Cauchy problem (1), and the explicit rate of convergence $(\varphi_n, X_n) \to (\varphi, X)$ (see Theorem 2.1 [5]) gives a basis to provide the estimate of the accuracy of Monte-Carlo method.

The main result of the current paper is the estimate of the accuracy of Monte-Carlo method for the approximations of the solution to the Cauchy problem (1) (see Theorem 2). The realization of such a method for the certain parameters is also provided.

1 Main objects and results

1.1 General theorem about the rate of convergence

Let's consider the sequence of processes $\{X_n,\ n \ge 1\}$, which provides the difference approximations of the diffusion process (2), in a form (see [4], (1.2)–(1.3)):

a) at the time moments $\frac{k}{n},\ k \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} X_n\left(\frac{k}{n}\right) &= X_n\left(\frac{k-1}{n}\right) \\ &+ a\left(X_n\left(\frac{k-1}{n}\right)\right) \cdot \frac{1}{n} \\ &+ b\left(X_n\left(\frac{k-1}{n}\right)\right) \cdot \frac{\xi_k}{\sqrt{n}}; \end{aligned} \tag{7}$$

b) at all the other time moments:

$$\begin{aligned} X_n(t) &= (nt - k + 1)\left[X_n\left(\frac{k}{n}\right) - X_n\left(\frac{k-1}{n}\right)\right] \\ &+ X_n\left(\frac{k-1}{n}\right),\ t \in \left[\frac{k-1}{n}, \frac{k}{n}\right). \end{aligned} \tag{8}$$

We also consider the sequence of non-negative additive functionals $\{\varphi_n^{s,t},\ 0 \le s \le t,\ n \ge 1\}$ of the processes X_n of the following form (see [5]):

$$\begin{aligned} &\varphi_n^{s,t} = \varphi_n^{s,t}(X_n) \stackrel{def}{=} \sum_{k:\ s \le k/n < t} F_n\left(X_n\left(\frac{k}{n}\right)\right), \\ &0 \le s < t,\ F_n(\cdot) \ge 0. \end{aligned} \tag{9}$$

Here and below ξ_k is a sequence of i.i.d. random vectors in $\mathbb{R}^m$, that have zero mean and the identity for covariance matrix.

Definition 1. *W-measure* (see [3], expression (8.37)) is a measure μ, which satisfies the following condition

$$\sup_x \int_{\|y-x\| \le 1} \omega(\|y-x\|)\mu(dy) < \infty,$$

where

$$\omega(r) = \begin{cases} \max\{-\ln r, 1\}, & m = 2 \\ r^{2-m}, & m > 2. \end{cases}$$

Definition 2. ([3], Chapter 6). A functional $\varphi^{s,t}$, $0 \le s \le t$ of the diffusion process X, defined in (2), is called *W-functional*, if φ is almost homogeneous continuous non-negative additive functional with the characteristic

$$f^t(x) \equiv E[\varphi^{0,t} | X(0) = x], \ t \ge 0, \ x \in \mathbb{R}^m,$$

which satisfies the condition

$$\sup_x f^t(x) < +\infty, \ t \ge 0.$$

Definition 3. ([2], Definition 16.21). *Lipschitz measure* is a function

$$\|\widetilde{\mu} - \widehat{\mu}\|_{Lip} = \sup_{f: Lip(f) \le 1} \left| \int\limits_{\mathbb{R}^m} f d\widetilde{\mu} - \int\limits_{\mathbb{R}^m} f d\widehat{\mu} \right|,$$

$\widetilde{\mu}, \widehat{\mu} \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^m)$, where $Lip(f)$ is a Lipschitz constant for the function f.

Definition 4. ([2], Definition 16.22). *The 2nd Wassershtein distance* between two probability measures $\widetilde{\mu}$ and $\widehat{\mu}$ is defined as

$$d_{W,2}(\widetilde{\mu}, \widehat{\mu}) = \inf_{(Y_1, Y_2) \in C(\widetilde{\mu}, \widehat{\mu})} \left[E\|Y_1 - Y_2\|^2 \right]^{\frac{1}{2}},$$

$\widetilde{\mu}, \widehat{\mu} \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^m)$, where $\mathcal{P}(\mathbb{R}^m)$ is a class of probability measures on $(\mathbb{R}^m, \mathcal{B}(\mathbb{R}^m))$, and $C(\widetilde{\mu}, \widehat{\mu})$ is a class of all random elements $Z = (Y_1, Y_2)$ with values in $(\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m, \mathcal{B}(\mathbb{R}^m) \times \mathcal{B}(\mathbb{R}^m))$, where the first component Y_1 has the distribution $\widetilde{\mu}$, and the second component Y_2 has the distribution $\widehat{\mu}$.

Now we provide the result of [5], which we will use further:

Theorem 1. *(Theorem 2.1 [5]). Let the processes X, $\{X_n, \ n \ge 1\}$ are those, that defined in (2) and (7)–(8) respectively, and the functionals $\varphi_n^{s,t}, \varphi^{s,t}$ have the distributions $\theta_n^{s,t}, \theta^{s,t}$. Let the following conditions hold:*

A1) $a \in C_b^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^m)$, $b \in C_b^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^{m \times m})$ and there exist positive constants C_1, C_2 such, that $C_1\|\vartheta\|^2 \le (b(x)b^*(x)\vartheta, \vartheta)_{\mathbb{R}^m} \le C_2\|\vartheta\|^2$, $x, \vartheta \in \mathbb{R}^m$;

A2) $\{\xi_k\}$ is a sequence of i.i.d. random vectors in $\mathbb{R}^m$, that have zero mean and the identity for covariance matrix;

A3) the vectors $\{\xi_k\}$ possess the distribution density $p \in C^4(\mathbb{R}^m)$. There exists a function ψ such, that

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^m} \psi(x) < +\infty, \int\limits_{\mathbb{R}^m} \|x\|^{m^2+2m+4} \psi(x) dx < +\infty,$$

$$\|[\nabla^i p](x)\| \le \psi(x), \ x \in \mathbb{R}^m, \ i = \overline{0,4};$$

A4) $F_n(x) \ge 0$ are bounded, $x \in \mathbb{R}^m$, $n \ge 1$ and there exists $\alpha > 0$:

$$\delta_n \stackrel{def}{=} \sup\{F_n(x) | \ x \in \mathbb{R}^m\} = O(n^{-\alpha}), \ n \to +\infty;$$

A5) Measures $\mu_n(dx) \equiv nF_n(x)\lambda^m(dx)$ converge weakly to the finite measure μ, that has a compact support;

A6) $\exists C \in \mathbb{R}^+, \ \nu > m - 2$:

$$\mu_n(\{y | \|y - x\| \le \varepsilon\}) \le C\varepsilon^\nu, \ n \ge 1, \ \varepsilon > 0;$$

A7) There exists $\beta > 0$:

$$\mu - \mu_n\|_{Lip} = O(n^{-\beta}), \ n \to +\infty;$$

A8) For the limiting functional φ the following condition holds:

$$\exists p > 2, r > 0, L > 0 : \ E(\varphi^{t',t''})^p \le L(t'' - t')^{r+1},$$

$0 < t' < t'' < T$.

Then

$$d_{W,2}^2\left(\theta_n^{0,T}, \theta^{0,T}\right) \le \begin{cases} Dn^{-\varkappa}, & m \ge 3, \\ Dn^{-\varkappa} \cdot \ln n, & m = 2, \end{cases}$$

where

$$\varkappa = \varkappa(\alpha, \beta, m, \nu, p, r),$$

$$\varkappa = \min\left\{ \frac{\chi(m,\nu)}{1 + \frac{p}{r}\chi(m,\nu)}, \frac{\alpha \cdot \chi(m,\nu)}{1 + \chi(m,\nu)}, \frac{2u(m,\nu) \cdot \min\left\{\beta, \frac{1}{2}\right\}}{2u(m,\nu) + m + 1} \right\},$$

$$\chi(m,\nu) = \min\left\{ \frac{1}{6}, \frac{\nu - (m-2)}{3(\nu + m)} \right\},$$

$$u(m,\nu) = \min\left\{ \frac{1}{2}, \frac{\nu - (m-2)}{4} \right\}.$$

1.2 Appliance: one parabolic equation with singular coefficient

Previous theoretical results of [4] and [5] give the interest to practical appliance – the estimate of the accuracy of the approximations of the solution $u(t,x)$ to parabolic equation (1) by $u_n(t,x)$ for the certain model.

We consider the sequence of sets $\{C_n,\ n \geq 0\}$ in $\mathbb{R}^2$:

$$C_n := \left\{(x_1,x_2)|1-n^{-\gamma} \leq x_1^2+x_2^2 \leq 1+n^{-\gamma}\right\},$$

$$0<\gamma<1,\ n \geq 1,\ C_0 := \left\{(x_1,x_2)|x_1^2+x_2^2=1\right\}.$$

We will denote by D a generic constant. This constant may vary from line to line.

Now we can formulate the main result of the current paper:

Theorem 2. *Let $u(t,x)$ be a solution to parabolic equation (1), defined in (5), and $u_n(t,x)$ be the approximations, defined in (6). Let also μ_n, μ be the probability measures, which are uniformly distributed on the sets C_n and C_0 respectively.*

If the conditions $A1)-A3)$ of the Theorem 1 hold, then, choosing $\gamma=\frac{7}{17}$, we have:

$$\sup_x |u_n(t,x)-u(t,x)|^2 \leq D\cdot n^{-\frac{1}{17}}\cdot \ln n.$$

Proof. It is easy to see, that

$$\mu_n(dx)=\frac{\mathbb{I}_{C_n}(x)}{\lambda^2(C_n)}\lambda^2(dx)=\frac{\mathbb{I}_{C_n}(x)}{4\pi n^{-\gamma}}\lambda^2(dx).$$

Now we put

$$F_n=\frac{\mathbb{I}_{C_n}(x)}{4\pi}n^{-(1-\gamma)}$$

and conditions $A4)-A5)$ of Theorem 1 hold with

$$\alpha=1-\gamma.$$

Let us consider any Lipschitz function f:

$$\int\limits_{\mathbb{R}^2} f d\mu_n=\frac{1}{\lambda^2(C_n)}\int\limits_{C_n} f(x)dx$$

$$=\frac{1}{\lambda^2(C_n)}\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_{1-n^{-\gamma}}^{1+n^{-\gamma}} \widetilde{f}(r,\varphi)drd\varphi,$$

where $\widetilde{f}(r,\varphi)=f(r\cos\varphi, r\sin\varphi)\cdot r$.

Analogously,

$$\int\limits_{\mathbb{R}^2} f d\mu=\frac{1}{2\pi}\int\limits_0^{2\pi}\widetilde{f}(1,\varphi)d\varphi.$$

Then, using

$$\frac{2n^{-\gamma}}{\lambda^2(C_n)}=\frac{1}{2\pi}$$

and the fact that $\widetilde{f}(\cdot)$ is a Lipschitz function, we have:

$$\left|\int\limits_{\mathbb{R}^2} f d\mu_n-\int\limits_{\mathbb{R}^2} f d\mu\right|$$

$$=\frac{1}{\lambda^2(C_n)}\left|\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_{1-n^{-\gamma}}^{1+n^{-\gamma}}(\widetilde{f}(r,\varphi)-\widetilde{f}(1,\varphi))drd\varphi\right|$$

$$\leq\frac{1}{\lambda^2(C_n)}\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_{1-n^{-\gamma}}^{1+n^{-\gamma}}\left|\widetilde{f}(r,\varphi)-\widetilde{f}(1,\varphi)\right|drd\varphi$$

$$\leq\frac{D\cdot n^{-\gamma}}{\lambda^2(C_n)}\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_{1-n^{-\gamma}}^{1+n^{-\gamma}} drd\varphi=Dn^{-\gamma}.$$

Thus, condition $A7)$ of Theorem 1 holds with

$$\beta=\gamma.$$

Taking into account the fact that the circle with radius r cuts an arc from C_0 with the length $\leq 2\pi r$, we have:

$$\mu(B(0,r))\leq r.$$

Using the representation

$$\mu_n=\mu*\eta_n$$

as the convolution of μ and uniform distribution η_n on $B(0,n^{-\gamma})$

$$\left(\Leftrightarrow \forall A\in\mathcal{B}(\mathbb{R}^2):\ \mu_n(A)=\int\limits_{\mathbb{R}^2}\mu(A-y)\eta_n(dy)\right),$$

we finally obtain the holding of condition $A6)$ with

$$C=1,\ \nu=1.$$

From the proof of Lemma 5.1 [5] we have, that it is sufficiently to take any

$$p>4,\ r(p)=\frac{\nu p}{4}-1=\frac{p}{4}-1$$

and enough large L to hold condition $A8$) true. The existence of such L is guaranteed by this lemma.

Thus, for any $0 < \gamma < 1,\ p > 4$ the conditions $A4) - A8)$ of Theorem 1 hold with parameters defined above. It is easy to see, that the result of Theorem 1 now can be written in the form:

$$d^2_{W,2}\left(\theta_n^{0,T}, \theta^{0,T}\right) \le D \cdot n^{-\varkappa} \cdot \ln n,$$

where

$$\varkappa = \min\left\{\frac{p-4}{13p-36},\ \frac{1-\gamma}{10},\ \frac{\min(\gamma, \frac{1}{2})}{7}\right\}.$$

For any fixed $p \ge 8$ the minimum is obtained for $\gamma = \frac{7}{17}$ and, therefore, $\varkappa = \frac{1}{17}$.

Now we are ready to estimate the rate of convergence:

$$|u_n(t,x) - u(t,x)|$$
$$\le E_x|g(X_n(t)) \cdot \exp(-\varphi_n^{0,t}) - g(X(t)) \cdot \exp(-\varphi^{0,t})|$$
$$\le E_x|(g(X_n(t)) - g(X(t))) \cdot \exp(-\varphi_n^{0,t})|$$
$$+E_x|g(X(t)) \cdot (\exp(-\varphi_n^{0,t}) - \exp(-\varphi^{0,t}))|$$
$$\le D \cdot E_x|g(X_n(t)) - g(X(t))|$$
$$+D \cdot E_x|\exp(-\varphi_n^{0,t}) - \exp(-\varphi^{0,t})|.$$

Put

$$S_1 = E_x|\exp(-\varphi_n^{0,t}) - \exp(-\varphi^{0,t})|,$$

$$S_2 = E_x|g(X_n(t)) - g(X(t))|.$$

Then:

$$|u_n(t,x) - u(t,x)| \le D \cdot (S_1 + S_2). \qquad (10)$$

Now, using simple inequality

$$|e^z - 1| \le |z| \cdot \max(1, e^z),\ z \in \mathbb{R},$$

we estimate S_1:

$$|\exp(-\varphi_n^{0,t}) - \exp(-\varphi^{0,t})|$$
$$= \exp(-\varphi^{0,t}) \cdot |1 - \exp(\varphi^{0,t} - \varphi_n^{0,t})|$$
$$\le |\varphi^{0,t} - \varphi_n^{0,t}| \cdot \exp(-\varphi^{0,t}) \cdot \max(1, \exp(\varphi^{0,t} - \varphi_n^{0,t}))$$
$$\le |\varphi^{0,t} - \varphi_n^{0,t}| \cdot \max(\exp(-\varphi^{0,t}), \exp(-\varphi_n^{0,t}))$$
$$\le |\varphi^{0,t} - \varphi_n^{0,t}|.$$

Then:

$$S_1 = E_x|\exp(-\varphi_n^{0,t}) - \exp(-\varphi^{0,t})|$$
$$\le E_x|\varphi^{0,t} - \varphi_n^{0,t}| \le (E_x|\varphi^{0,t} - \varphi_n^{0,t}|^2)^{\frac{1}{2}}$$
$$\le D \cdot n^{-\frac{1}{34}} \cdot \sqrt{\ln n}.$$

Now, taking into account that $g(\cdot)$ is a Lipschitz function and using inequality ([4], (3.10)):

$$S_2 = E_x|g(X_n(t)) - g(X(t))|$$
$$\le D \cdot E_x\|X_n(t) - X(t)\|$$
$$\le D \cdot (E_x\|X_n(t) - X(t)\|^2)^{\frac{1}{2}} \le D \cdot \sqrt{\varepsilon},$$

where (see [5], proof of Theorem 2.1)

$$\varepsilon = n^{-\lambda} = n^{-\frac{\alpha}{1+\chi}} = n^{-\frac{9}{17}}.$$

Finally, we have:

$$\|u_n(t,\cdot) - u(t,\cdot)\|^2 = \sup_x |u_n(t,x) - u(t,x)|^2$$
$$\le D \cdot \sup_x (S_1 + S_2)^2 \le D \cdot n^{-\frac{1}{17}} \cdot \ln n.$$

2 Realization of Monte-Carlo method

We illustrate the influence of the singular coefficient on the solution to the Cauchy problem (1).

For this we define the certain system parameters:

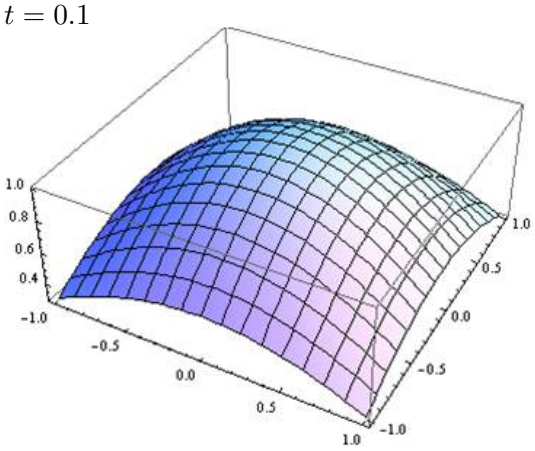
$$a(x_1, x_2) = (\sin(x_2), \sin(x_1)),\ b(x_1, x_2) \equiv \mathbb{I},$$

$$g(x_1, x_2) = \cos(x_1)\cos(x_2),\ \xi_k \sim \aleph(0, \mathbb{I}),$$

where $\mathbb{I}$ is an identity matrix.

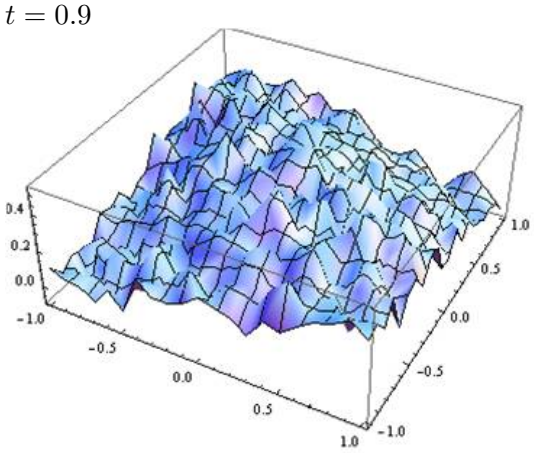
Using Mathematica package, we sketch the graphs of the 10^{th} approximation of the solution to (1) at time moments

$t = 0.1$



and

$t = 0.9$



respectively. 50 samples were generated to calculate the expectation in (6).

As we can see, there appears the smoothing of the structural peak near zero.

Список використаних джерел

[1] *Sznitman A.* Brownian motion, obstacles and random media / A. Sznitman.— Berlin: Springer. — 1998. — P. 353.

[2] *Гусак Д.В.* Збірник задач з теорії випадкових процесів та її застосувань / Д.В. Гусак, О.Г. Кукуш, О.М. Кулик, Ю.С. Мішура, А.Ю. Пилипенко.— Київ: ВПЦ Київський університет.— 2008. — 398 с.

[3] *Дынкин Е.Б.* Марковские процессы / Е.Б. Дынкин.— Москва: Физматгиз. — 1963. — 860 с.

[4] *Kulik A.M.* Difference approximation for local times of multidimensional diffusions / A.M. Kulik.— Prob. Theory and Math. Stat.— 2008.— Vol. 78. — P. 67–83.

[5] *Ганиченко Ю.В.* Оцінка швидкості збіжності послідовності адитивних функціоналів від різницевих апроксимацій багатовимірного дифузійного процесу / Ю.В. Ганиченко.— Теорія ймовірностей та математична статистика. — 2014.— Вип. 90. — С. 22–38.

References

1. SZNITMAN, A. (1998) *Brownian motion, obstacles and random media.* Berlin: Springer.

2. GUSAK, D.V., KUKUSH, O.G., KULIK, A.M., MISHURA, Yu.S. and PYLYPENKO, A.Yu. (2008) *Zbirnyk zadach z teoriyi vypadkovykh protsesiv ta yiyi zastosuvan.* Kyyiv: VPTs Kyyivskyy Universytet.

3. DYNKIN, E.B. (1963) *Markovskie protsessyi.* Moskva: Fizmatgiz.

4. KULIK, A.M. (2008) Difference approximation for local times of multidimensional diffusions. *Prob. Theory and Math. Stat.* 78. p. 67–83.

5. GANYCHENKO, Yu.V. (2014) Otsinka shvydkosti zbizhnosti poslidovnosti adytyvnykh funktsionaliv vid riznytsevykh aproksymatsiy bagatovymirnogo dyfuzi-ynogo protsesu. *Teoriya imovirnostey ta matematychna statystyka.* 90. p. 22–38.

Received: 06.03.2014

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

УДК 517.9

Асроров Ф. А. [1], к.ф.-м.н., н.с.

Збурення інтегральної множини нелінійної системи з імпульсним впливом

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка,83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: farhod@univ.kiev.ua

F. A. Asrorov[1],candidate of phys. and mathem. sci.

The perturbation of integral set of nonlinear impulsive system

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,

e-mail: farhod@univ.kiev.ua

Робота пов'язана з теорією багаточастотних коливань і теорією диференціальних рівнянь з імпульсними збуреннями. Незалежність правої частини першого з цих рівнянь від x є істотною умовою при дослідженні існування інтегральних множин в системах рівнянь. Це дозволяє представляти інтегральну множину за допомогою однієї і тієї ж функції Гріна - Самойленка на кожному кроці відповідного ітераційного процесу. Якщо права частина згаданого вище рівняння залежить від x, задача встановлення умов існування інтегральних множин в системах з імпульсним впливом істотно ускладнюється.

Ключові слова: функція Гріна-Самойленко, інтегральна множина, імпульсна дія.

The article related to the theory of multifrequency oscillations and the theory of differential equations with impulse perturbations. Integral sets of impulsive systems of differential equations are studied. Questions about existence of integral sets for non-autonomous systems of differential equations are studied. For this purpose we use iteration process. As a result we obtain integral sets as a limit of specially constructed sets. The independence of the right-hand side of the first of these equations from x is an essential condition for the study of the existence of integral sets of the system. It allows to represent an integral set using the Green-Samoilenko function at each step of corresponding iterative process. If the right-hand side of the above equation depends on the x the problem of establishing conditions for the existence of integral sets in systems with impulse actions is more complex.

Keywords: Green-Samoilenko function, integral set, impulsive action.

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

Розглянемо систему диференціальних рівнянь з імпульсною дією загального вигляду

$$\frac{d\varphi}{dt} = a(t,\varphi,x), \quad \frac{dx}{dt} = F(t,\varphi,x), \quad t \neq \tau_i, \qquad \Delta x\Big|_{t=\tau_i} = I_i(\varphi,x), \tag{1}$$

в якій праві частини неперервні за своїми змінними, визначені в області:

$$\|x\| \le d,\ t \in R,\ \varphi \in \Im_m, \tag{2}$$

і є періодичними по $\varphi_\nu, \nu = \overline{1,m}$ з періодом 2π, де $\Im_m - m-$ мірний тор.

Існування інтегральної множини систем (1) ускладнюється нелінійністю функцій a, F і I по зміній x. Це питання ми будемо вирішувати в рамках теорії збурень, що припускає певну малість величин

$$\|a(t,\varphi,x) - a(t,\varphi,0)\|, \|F(t,\varphi,x) - F(t,\varphi,0)\|,$$
$$\|I_i(\varphi,x) - I(\varphi,0)\|$$

в області (2). Успіх при цьому досягається за рахунок використання ітераційних процесів, лінеарізіруючих ту чи іншу задачу на кожному кроці ітерації.

Наведемо один з процесів лінеаризації, що дозволяє відшукувати інтегральну множину

$$x = u(t,\varphi),\ t \in R,\ \varphi \in \Im_m \tag{3}$$

системи (1). Для цього виділимо з системи (1) "лінійні" члени, записавши цю систему рівнянь у вигляді

© Ф.А.Асроров, 2014

$$\frac{d\varphi}{dt}=a(t,\varphi,x),\frac{dx}{dt}=P(t,\varphi,x)x+f(t,\varphi),\ t\neq\tau_i,\\ \Delta x\big|_{t=\tau_i}=B_i(\varphi,x)x+I_i(\varphi), \quad (4)$$

де позначено

$$f(t,\varphi)=F(t,\varphi,0),\quad P(t,\varphi,x)=\int_0^1\frac{\partial F(t,\varphi,\tau x)}{\partial(\tau x)}d\tau,$$

$$B_i(\varphi,x)=\int_0^1\frac{\partial I_i(\varphi,\tau x)}{\partial(\tau x)}d\tau,\quad I_i(\varphi)=I_i(\varphi,0).$$

Інтегральну множину системи рівнянь (4) будемо шукати ітераційним шляхом.

Задамо нульову ітерацію процесу функцією $u^0(t,\varphi)\in C(R\times\Im_m)$, де $C(R\times\Im_m)$ клас кусково-неперервних по t з розривами першого роду в точках τ_i неперервних по $\varphi\in\Im_m$, $2\pi-$ періодичних по $\varphi_\nu,\nu=\overline{1,m}$, обмежених при $t\in R,\varphi\in\Im_m$ функцій, що приймають значення в області (2), так що $\left\|u^0(t,\varphi)\right\|\le d$ при всіх $t\in R,\varphi\in\Im_m$, і визначимо послідовність множин

$$x=u^{(i+1)}(t,\varphi),\quad t\in R,\varphi\in\Im_m,\quad i=0,1,\ldots \quad (5)$$

кожна з яких є інтегральною множиною системи рівнянь

$$\frac{d\varphi}{dt}=a(t,\varphi,u^{(i)}(t,\varphi)),\\ \frac{dx}{dt}=P(t,\varphi,u^{(i)}(t,\varphi))x+f(t,\varphi),\quad t\neq\tau_i, \quad (6)$$

$$\Delta x\big|_{t=\tau_i}=B_i(\varphi,u^{(i)}(\tau_i,\varphi))x+I_i(\varphi).$$

Лемма 1. Нехай функції a,P,B_i,f,I_i визначені і кусково-розривні по t з розривами першого роду в точках $t=\tau_i$, неперервні по φ і x, і є періодичними по $\varphi_\nu,\nu=\overline{1,m}$, з періодом 2π. Припустимо, що для будь-якого $i=0,1,\ldots$ система рівнянь (6) має інтегральну множину (5), що належить області (2).

Тоді, якщо $\lim\limits_{i\to\infty}u^i(t,\varphi)=u(t,\varphi)$ рівномірно по $t\in R,\varphi\in\Im_m$, то гранична функція $u(t,\varphi)$ визначає інтегральну множину (3) системи рівнянь (4).

Доведення леми 1 аналогічне доведенню леми 1 з [5].

Реалізація наведеного процесу лінеаризації системи рівнянь (4) вимагає з'ясування умов, при яких система рівнянь

$$\frac{d\varphi}{dt}=a(t,\varphi)+a_1(t,\varphi),\\ \frac{dx}{dt}=\big(P(t,\varphi)+P_1(t,\varphi)\big)x+f(t,\varphi),\quad t\neq\tau_i, \quad (7)$$

$$\Delta x\big|_{t=\tau_i}=\big(B_i(\varphi)+B_i^1(\varphi)\big)x+I_i(\varphi),$$

має інтегральну множину (3) для довільних досить малих за нормою простору $C(R\times\Im_m)$ функцій $a_1(t,\varphi),P_1(t,\varphi),B_i^1(\varphi)$. Під нормою функції $a(t,\varphi)\in C(R\times\Im_m)$ ми розуміємо наступну величину

$$\left\|a(t,\varphi)\right\|_0=\sup_{t\in R}\max_{\varphi\in\Im_m}\left\|a(t,\varphi)\right\|.$$

Ці умови існування інтегральної множини системи рівнянь (7) вимагають деяку грубість функцій Гріна-Самойленка системи рівнянь

$$\frac{d\varphi}{dt}=a(t,\varphi),\ \frac{dx}{dt}=P(t,\varphi)x,\quad t\neq\tau_i,\\ \Delta x\big|_{t=\tau_i}=B_i(\varphi)x. \quad (8)$$

Поряд з системою (8) розглянемо систему

$$\frac{d\varphi}{dt}=a(t,\varphi)+a_1(t,\varphi),\ \frac{dx}{dt}=P(t,\varphi)x,t\neq\tau_i,\\ \Delta x\big|_{t=\tau_i}=B_i(\varphi)x, \quad (9)$$

де $a_1(t,\varphi)$ задовольняє умову Ліпшиця по φ, рівномірно відносно $t\in R$.

Означення. Функцію Гріна-Самойленка $G(t,s,\varphi)$ системи рівнянь (8) будемо називати грубою, якщо знайдеться таке постійне число $\delta>0$, що система рівнянь (9) при $\left\|a_1\right\|_0\le\delta$ має функцію Гріна-Самойленко $\bar G(t,s,\varphi)$, для якої

$$\left\|\bar G(t,s,\varphi)f(t,\varphi_t(\tau,\varphi))\right\|_0\le Ke^{-\gamma|t-s|}\left\|f(t,\varphi)\right\|_0, \quad (10)$$

де f - довільна функція з $C(R\times\Im_m)$, $\varphi_t(\tau,\varphi)$ - розв'язок першого з рівнянь (9), K і γ - додатні сталі, які не залежать від φ,δ та f.

Лемма 2. Нехай система рівнянь (8) має грубу функцію Гріна-Самойленка $G(t,s,\varphi)$. Тоді можна вказати таке число $\rho=\rho(\delta)>0,\rho(\delta)\to0$ при $\delta\to0$, що для будь-яких $a_1,P_1,B_i^1\in C(R\times\Im_m)$, що задовольняють умову

$$\left\|a_1\right\|_0+\left\|P_1\right\|_0+\left\|B_i^1\right\|_0\le\rho, \quad (11)$$

і довільних $f,I_i\in C(R\times\Im_m)$ система рівнянь (7) має інтегральну множину (3), що задовольняє умову

$$\left\|u(t,\varphi)\right\|_0\le K_1\left[\left\|f(t,\varphi)\right\|_0+\left\|I_i(\varphi)\right\|_0\right], \quad (12)$$

де K_1- додатна стала, яка не залежна від ρ, f і I_i.

Основна теорема

Розглянемо систему диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned}&\frac{d\varphi}{dt} = a(t,\varphi,x,\varepsilon),\\ &\frac{dx}{dt} = P(t,\varphi,x,\varepsilon)x + f(t,\varphi,\varepsilon),\ t \neq \tau_i,\\ &\Delta x\Big|_{t=\tau_i} = B_i(\varphi,x,\varepsilon)x + I_i(\varphi,\varepsilon),\end{aligned} \tag{13}$$

де a, P, B_i, f, I_i- періодичні по $\varphi_\nu \left(\nu = \overline{1,m}\right)$ періоду 2π функції, визначені по $t \in R, \varphi \in \Im_m$ в області

$$\|x\| \le d, \varepsilon \in [0,\varepsilon_0], \tag{14}$$

кусково-неперервні по t з розривами першого роду в точках $t = \tau_i$, неперервні за змінними φ, x, ε і такі, що

$$f(t,\varphi,0) \equiv 0, I_i(\varphi,0) \equiv 0,\ \ t \in R, \varphi \in \Im_m, i \in Z. \tag{15}$$

Умова (15) гарантує існування тривіальної інтегральної множини

$$x = 0,\ \ t \in R, \varphi \in \Im_m \tag{16}$$

системи (13) при $\varepsilon = 0$.

Запишемо рівняння у варіаціях, відповідно до інтегральної множини (16). Воно має вигляд

$$\begin{aligned}&\frac{d\varphi}{dt} = a_0(t,\varphi),\ \ \frac{dx}{dt} = P_0(t,\varphi)x,\ \ t \neq \tau_i,\\ &\Delta x\Big|_{t=\tau_i} = B_i^0(\varphi)x,\end{aligned} \tag{17}$$

де позначено $a_0(t,\varphi) = a(t,\varphi,0,0)$, $P_0(t,\varphi) = P(t,\varphi,0,0)$, $B_i^0(\varphi) = B_i(\varphi,0,0)$.

Вкажемо умови, що забезпечують існування інтегральної множини рівнянь (13) при $\varepsilon \neq 0$.

Теорема. Нехай функції a, P, B_i, f, I_i, що визначають систему рівнянь (13), двічі неперервно диференційовні по φ, x, ε в області (14). Припустимо, що система (17) має грубу функцію Гріна-Самойленка.

Тоді можна вказати досить мале $\varepsilon_0 > 0$ таке, що для будь-якого $\varepsilon \in [0,\varepsilon_0]$ система рівнянь (13) має інтегральну множину

$$x = u(t,\varphi,\varepsilon), t \in R, \varphi \in \Im_m, \tag{18}$$

причому

$$\lim_{\varepsilon \to 0} u(t,\varphi,\varepsilon) = 0.$$

Доведення. Перепишемо систему рівнянь (13) у вигляді

$$\begin{aligned}&\frac{d\varphi}{dt} = a_0(t,\varphi) + a_1(t,\varphi,x,\varepsilon),\\ &\frac{dx}{dt} = \left[P_0(t,\varphi) + P_1(t,\varphi,x,\varepsilon)\right]x + f(t,\varphi,\varepsilon),\ t \neq \tau_i,\\ &\Delta x\Big|_{t=\tau_i} = \left[B_i^0(\varphi) + B_i^1(\varphi,x,\varepsilon)\right]x + I_i(\varphi,\varepsilon),\end{aligned} \tag{19}$$

поклавши $a_1(t,\varphi,x,\varepsilon) = a(t,\varphi,x,\varepsilon) - a(t,\varphi,0,0)$,

$P_1(t,\varphi,x,\varepsilon) = P(t,\varphi,x,\varepsilon) - P(t,\varphi,0,0)$,

$B_i^1(\varphi,x,\varepsilon) = B(\varphi,x,\varepsilon) - B(\varphi,0,0)$,

і застосуємо для відшукання інтегральної множини (18) цієї системи ітераційний процес. Нульову ітерацію процесу задамо функцією $u^0(t,\varphi,\varepsilon) \equiv 0, t \in R, \varphi \in \Im_m$. Перше наближення $u_1(t,\varphi,\varepsilon)$ визначимо із системи рівнянь

$$\begin{aligned}&\frac{d\varphi}{dt} = a_0(t,\varphi) + a_1(t,\varphi,0,\varepsilon),\\ &\frac{dx}{dt} = \left[P_0(t,\varphi) + P_1(t,\varphi,0,\varepsilon)\right]x + f(t,\varphi,\varepsilon),\ t \neq \tau_i,\\ &\Delta x\Big|_{t=\tau_i} = \left[B_i^0(\varphi) + B_i^1(\varphi,0,\varepsilon)\right]x + I_i(\varphi,\varepsilon)\end{aligned} \tag{20}$$

її інтегральну множину

$$x = u_1(t,\varphi,\varepsilon),\ \ t \in R, \varphi \in \Im_m. \tag{21}$$

Виберемо $\varepsilon_0 > 0$ настільки малим, щоб виконувалася нерівність

$$\begin{aligned}&\left\|a_1(t,\varphi,u(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right\|_0 + \left\|P_1(t,\varphi,u(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right\|_0 +\\ &+\left\|B_i^1(\varphi,u(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right\|_0 \le \rho,\end{aligned} \tag{22}$$

де $u(t,\varphi,\varepsilon) \in C(R \times \Im_m)$ довільна функція, що задовольняє нерівність

$$\sup_{t \in R}\max_{\varphi \in \Im_m}\|u(t,\varphi,\varepsilon)\| \le K_1\left[\left\|f(t,\varphi,\varepsilon)\right\|_0 + \left\|I_i(\varphi,\varepsilon)\right\|_0\right], \tag{23}$$

де ρ і K_1 – додатні сталі, які визначаються лемою 2. Припущення про неперервність функцій a_1, P_1, B_i^1 по φ, x, ε разом з умовою (15) гарантують можливість зазначеного вибору величини ε_0.

Права частина системи (20) задовольняє тоді для всіх $\varepsilon \in [0,\varepsilon_0]$ умовам леми 2. Отже, інтегральна множина (21) цієї системи існує і задовольняє нерівність

$$\sup_{t \in R}\max_{\varphi \in \Im_m}\|u_1(t,\varphi,\varepsilon)\| \le K_1\left[\left\|f(t,\varphi,\varepsilon)\right\|_0 + \left\|I_i(\varphi,\varepsilon)\right\|_0\right], \tag{21}$$

де K_1 – стала, що входить в оцінку (23). Цього достатньо, щоб по першій ітерації (21) знайти другу, що задовольняє оцінці виду (24).

Припустимо, що для обраного $\varepsilon_0 > 0$ вже знайдені всі ітерації для $i = 1,\ldots,p-1$ і що всі вони задовольняють нерівності виду (24). Наступне, p – те наближення визначається тоді з системи рівнянь

$$\begin{aligned}&\frac{d\varphi}{dt}=a_0(t,\varphi)+a_1(t,\varphi,u_{p-1}(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon),\\&\frac{dx}{dt}=\left[P_0(t,\varphi)+P_1(t,\varphi,u_{p-1}(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right]x+\\&+f(t,\varphi,\varepsilon),\ t\neq\tau_i,\\&\Delta x\Big|_{t=\tau_i}=\left[B_i^0(\varphi)+B_i^1(\varphi,u_{p-1}(\tau_i,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right]x+\\&+I_i(\varphi,\varepsilon)\end{aligned}\qquad(25)$$

як її інтегральна множина

$$x=u_p(t,\varphi,\varepsilon),t\in R,\varphi\in\Im_m.\qquad(26)$$

Так як функції $a_1(t,\varphi,u_{p-1}(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)$,

$P_1(t,\varphi,u_{p-1}(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)$, $B_i^1(\varphi,u_{p-1}(\tau_i,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)$

задовольняють для всіх $\varepsilon\in[0,\varepsilon_0]$ нерівності (22), то інтегральна множина (26) системи (25) існує і задовольняє умові

$$\begin{aligned}&\sup_{t\in R}\max_{\varphi\in\Im_m}\left\|u_p(t,\varphi,\varepsilon)\right\|\leq\\&\leq K_1\left[\left\|f(t,\varphi,\varepsilon)\right\|_0+\left\|I_i(\varphi,\varepsilon)\right\|_0\right].\end{aligned}\qquad(27)$$

За методом повної математичної індукції переконуємося, що для всіх $\varepsilon\in[0,\varepsilon_0]$ будь-яка з ітерацій $u_p(t,\varphi,\varepsilon)$, $p=1,2,\ldots$ визначена і задовольняє нерівності виду (27).

Доведемо збіжність ітераційного процесу. Для цього розглянемо різницю

$$w_{i+1}(t,\varphi,\varepsilon)=u_{i+1}(t,\varphi,\varepsilon)-u_i(t,\varphi,\varepsilon).$$

Відзначимо, що в силу двічі неперервної диференційовності при $t\neq\tau_i$ функцій, що визначають систему рівнянь (13), інтегральні множини $u_i(t,\varphi,\varepsilon)$ будуть неперервно диференційовними при $t\neq\tau_i$. Тому

$$\begin{aligned}&\frac{\partial u_i(t,\varphi,\varepsilon)}{\partial t}+\frac{\partial u_i(t,\varphi,\varepsilon)}{\partial\varphi}\left(a_0(t,\varphi)+\right.\\&\left.+a_1(t,\varphi,u_{i-1}(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right)=\\&=\left[P_0(t,\varphi)+P_1(t,\varphi,u_{i-1}(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right]u_i(t,\varphi,\varepsilon)+\\&+f(t,\varphi,\varepsilon),\ t\neq\tau_i,\\&\Delta u_i(t,\varphi,\varepsilon)\Big|_{t=\tau_i}=\left[B_i^0(\varphi)+B_i^1(\varphi,u_{i-1}(\tau_i,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right]\times\\&\times u_i(\tau_i,\varphi,\varepsilon)+I_i(\varphi,\varepsilon)\end{aligned}\qquad(28)$$

для всіх $t\in R,\ \varphi\in\Im_m$ і $i=1,2,\ldots$. Звідси випливає, що функція $w_{i+1}(t,\varphi,\varepsilon)$ задовольняє рівнянню

$$\begin{aligned}&\frac{\partial w}{\partial t}+\frac{\partial w}{\partial\varphi}\left(a_0(t,\varphi)+a_1(t,\varphi,u_i(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right)=\\&=\left[P_0(t,\varphi)+P_1(t,\varphi,u_i(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right]w+\\&+f_i(t,\varphi,\varepsilon),\ t\neq\tau_i,\\&\Delta w\Big|_{t=\tau_i}=\left[B_i^0(\varphi)+B_i^1(\varphi,u_i(\tau_i,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right]w+\\&+I_i^j(\varphi,\varepsilon),\end{aligned}\qquad(29)$$

де позначено

$$\begin{aligned}&f_i(t,\varphi,\varepsilon)=\left[P_1(t,\varphi,u_i(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)-P_1(t,\varphi,u_{i-1}(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right]\times\\&\times u_i(t,\varphi,\varepsilon)-\frac{\partial u_i(t,\varphi,\varepsilon)}{\partial\varphi}\left[a_1(t,\varphi,u_i(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)-\right.\\&\left.-a_1(t,\varphi,u_{i-1}(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right],\\&I_i^j(\varphi,\varepsilon)=\left[B_i^1(\varphi,u_i(\tau_i,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)-B_i^1(\varphi,u_{i-1}(\tau_i,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right]\times\\&\times u_i(\tau_i,\varphi,\varepsilon).\end{aligned}$$

Тому множина, яка задається рівнянням

$$x=u_{i+1}(t,\varphi,\varepsilon),\quad t\in R,\varphi\in\Im_m,$$

є інтегральною множиною системи рівнянь

$$\begin{aligned}&\frac{d\varphi}{dt}=a_0(t,\varphi)+a_1(t,\varphi,u_i(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon),\\&\frac{dx}{dt}=\left[P_0(t,\varphi)+P_1(t,\varphi,u_i(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right]x+\\&+f_i(t,\varphi,\varepsilon),t\neq\tau_i,\\&\Delta x\Big|_{t=\tau_i}=\left[B_i^0(\varphi)+B_i^1(\varphi,u_i(\tau_i,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)\right]x+\\&+I_i^j(\varphi,\varepsilon)\end{aligned}\qquad(30)$$

для всіх $\varepsilon\in[0,\varepsilon_0]$. Оскільки функції $a_1=a_1(t,\varphi,u_i(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)$, $P_1=P_1(t,\varphi,u_i(t,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)$, $B_i^1(\varphi,u_i(\tau_i,\varphi,\varepsilon),\varepsilon)$ при $\varepsilon\in[0,\varepsilon_0]$ задовольняють нерівності (22), а функції f_i і I_i^j неперервні, то система рівнянь (30) задовольняє умовам леми 2. Оцінка (12) для $w_{i+1}(t,\varphi,\varepsilon)$ набуває вигляду

$$\begin{aligned}&\sup_{t\in R}\max_{\varphi\in\Im_m}\left\|w_{i+1}(t,\varphi,\varepsilon)\right\|\leq\\&\leq K_1\left[\left\|f_i(t,\varphi,\varepsilon)\right\|_0+\left\|I_i^j(\varphi,\varepsilon)\right\|_0\right]\leq\\&\leq K\left(\left\|u_i(t,\varphi,\varepsilon)\right\|_0+\left\|\frac{\partial u_i(t,\varphi,\varepsilon)}{\partial\varphi}\right\|_0\right)\left\|w_i(t,\varphi,\varepsilon)\right\|_0,\end{aligned}\qquad(31)$$

де K - деяка стала, яка не залежить від i та ε. Нерівність (31) з урахуванням оцінок виду (27) для ітерацій доводить, що

$$\begin{aligned}&\sup_{t\in R}\max_{\varphi\in\Im_m}\left\|w_{i+1}(t,\varphi,\varepsilon)\right\|_0\leq KK_1\left[\left\|f_i(t,\varphi,\varepsilon)\right\|_0+\left\|I_i^j(\varphi,\varepsilon)\right\|_0\right]\times\\&\times\left\|w_{i+1}(t,\varphi,\varepsilon)\right\|_0\leq\frac{1}{2}\sup_{t\in R}\max_{\varphi\in\Im_m}\left\|w_i(t,\varphi,\varepsilon)\right\|_0\end{aligned}$$

для всіх $\varepsilon\in[0,\varepsilon_0]$ при досить малому $\varepsilon_0>0$.

Але тоді

$$\sup_{t\in R}\max_{\varphi\in\Im_m}\left\|w_i(t,\varphi,\varepsilon)\right\|\leq\left(\frac{1}{2}\right)^{i-1}\sup_{t\in R}\max_{\varphi\in\Im_m}\left\|w_i(t,\varphi,\varepsilon)\right\|,$$

$i=1,2,\ldots,$

що забезпечує рівномірну збіжність послідовності $u_i(t,\varphi,\varepsilon),i=1,2,\ldots$. Отже, знайдеться функція $u(t,\varphi,\varepsilon)\in C(R\times\Im_m)$ для кожного $\varepsilon\in[0,\varepsilon_0]$ і така, що

$$\lim_{i\to\infty}u_i(t,\varphi,\varepsilon)=u(t,\varphi,\varepsilon)$$

рівномірно по $t\in R,\ \varphi\in\Im_m,\ \varepsilon\in[0,\varepsilon_0]$.

В силу неперервності функції $u(t,\varphi,\varepsilon)$ по ε і умові (15) переконуємося, що $\lim\limits_{\varepsilon\to 0} u(t,\varphi,\varepsilon)=0$ рівномірно відносно $t\in R, \varphi\in\Im_m$. Теорему доведено.

Список використаних джерел

1. *Асроров Ф.А., Фекета П.В.* Обмежені розв'язки лінійних неоднорідних систем з імпульсною дією // Наук. вісн. Ужгород. ун.-ту. Сер. матем. і інформ. 2010. – Вип.20. С. 4-12.
2. *Асроров Ф.А., Перестюк Н.А.* Функция Грина-Самойленко и существование интегральных множеств линейных расширений неавтономных систем // Укр. мат. журн. 1994. т. 46, №8. С. 1067-1071.
3. *Митропольский Ю.А., Самойленко А.М., Кулик В.Л.* Исследование дихотомии линейных систем дифференциальных уравнений с помощью функций Ляпунова. – Киев: Наук. думка, 1990. 272 с.
4. Perestyuk N.A., Plotnikov N.A., Samoilenko A.M., Skripnik N.V. (2011) Differential equations with impulsive effects: multivalued right-hand sides with discontinuous. De Gruyter 2011.
5. *Самойленко А.М.* Элементы математической теории многочастотных колебаний. Инвариантные торы. – М: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. – 304 с.
6. *Самойленко А.М., Перестюк Н.А.* Дифференциальные уравнения с импульсным воздействием. – К.: Вища шк. Головное изд-во, 1987. – 288 с.
7. *Фекета П.В., Асроров Ф.А.* Інтегральні множини розширень неавтономних систем на торі з імпульсними збуреннями // Наук. вісн. Ужгород. ун.-ту. Сер. матем. і інформ. 2012. – Вип.23. С. 125-132.
8. *Samoilenko A.M., Perestyuk N.A.* Impulsive differential equations. Singapore: World Scientific 1995.

References

1. ASROROV F.A., FEKETA P.V. (2010) *Bounded solutions of linear inhomogeneous systems with impulsive action // Bull. Uzhhorod University. Math. and Informatics Series, 2010. – vol.20. p. 4-12.*
2. ASROROV F.A., PERESTYUK N.A. (1994) *Green-Samoilenko function and existence of integral sets of linear extensions of non-autonomous systems* // Ukr. Mat. Zhurn. 1994. vol. 46, No. 8. p. 1067-1071.
3. MITROPOLSKY YU.A., SAMOILENKO A.M., KULYK V.L. (1990) *Investigation of dichotomy of linear systems of differential equations via Lyapunov functions*. – Kyiv: Nauk. dumka, 1990. 272 c.
4. PERESTYUK N.A., PLOTNIKOV N.A., SAMOILENKO A.M., SKRIPNIK N.V. (2011) Differential equations with impulsive effects: multivalued right-hand sides with discontinuous. De Gruyter 2011.
5. SAMOILENKO A.M. (1987) Elements of mathematical theory of multi-frequency oscillations. Invariant tori. – M: Nauka,1987. – 304 p.
6. SAMOILENKO A.M., PERESTYUK N.A. (1987) Differential equations with impulsive actions. – K.: Vyshcha shkola, 1987. – 288 p.
7. FEKETA P.V., ASROROV F.A. (2012) *Integral sets of extensions of non-autonomous systems on torus with impulsive perturbations// Bull. Uzhhorod University. Math. and Informatics Series, 2012. – vol.23. p. 125-132.*
8. SAMOILENKO A.M., PERESTYUK N.A. (1995) Impulsive differential equations. Singapore: World Scientific 1995.

Надійшла до редколегії 06.07.2014

УДК 539.3

Багно О.М., д.ф.-м.н., пров.н.с.

Поширення хвиль у попередньо деформованому стисливому пружному шарі, який взаємодіє з шаром ідеальної стисливої рідини

Інститут механіки імені С.П. Тимошенка Національної академії наук України, 03057, м. Київ, вул. Нестерова, 3
e-mail: alexbag2010@mail.ru

Bahno O.M., doctor of phys. - math. sci.

Propagation of waves in a pre-deformed compressible elastic layer that interacts with a layer of an ideal compressible liquid

S. P. Timoshenko Institute of Mechanics, National Academy of Sciences of Ukraine, 3, Nesterova Street, Kyiv, Ukraine, 03057
e-mail: alexbag2010@mail.ru

Досліджується із залученням тривимірних рівнянь лінеаризованої теорії пружності скінчених деформацій хвильовий процес у попердньо деформованому стисливому пружному шарі, що контактує з шаром ідеальної стисливої рідини. Вивчається вплив початкових напружень на частотний спектр нормальних хвиль у гідропружній системі.

Ключові слова: пружний стисливий шар, шар ідеальної стисливої рідини, початкові напруження, гармонічні хвилі.

Problem about acoustic waves propagation in preliminarily deformed elastic medium, which contacts with layer of ideal compressible liquid, is under consideration. Investigation is done on the basis of three-dimensional equations of the linearized theory of elasticity for finite deformations of rigid layer and the three-dimensional linearized Euler Equations for ideal compressible liquid. We used statement of the problem and approach, which are based on representation of general solutions of linearized equations for elastic and liquid layers. Dispersion equation, which describes propagation of harmonic waves in hydroelastic system in wide range of frequencies, is derived. Characteristic equation is solved numerically and dispersion curves for wide range of frequencies for thick elastic layer are constructed. We analyzed effect of initial deformations, thickness of layers of elastic body and liquid on phase velocities of normal modes. It was shown that starting from the second mode there thicknesses of liquid layer and certain frequencies, for which preliminary deformation has no effect on their phase velocities.

Key Words: elastic compressible layer, layer of ideal compressible fluid, initial stresses, harmonic waves.

Статтю представив доктор фізико-математичних наук, професор Жук Я.О.

Вступ

Хвилі, що поширюються вздовж границі контакту пружного шару та шару рідини, належать до числа узагальнень ґрунтовно досліджених основних типів поверхневих акустичних хвиль: Релея, Лява, Стоунлі та Лемба. Огляд робіт і аналіз результатів, отриманих у рамках класичної теорії пружності, наведено в [1]. Разом з тим, значне практичне використання поверхневих хвиль вимагає врахування властивостей, які притаманні реальним тілам. До числа таких факторів належать початкові напруження. Створені цілеспрямовано, або такі, що виникли в результаті технологічних процесів при виготовлені, вони мають суттєвий вплив на хвильові процеси. Задачі, які розглянуто, та результати, що отримані з урахуванням у тілах початкових напружень, наведено в [2]. Дане повідомлення присвячене дослідженню в рамках тривимірних рівнянь лінеаризованої теорії пружності при скінчених деформаціях впливу початкових напружень на швидкості нормальних хвиль у попередньо деформованому пружному шарі, що взаємодіє з шаром ідеальної стисливої рідини.

Математична модель

Будемо розглядати такі динамічні процеси у гідропружній системі, при яких додаткові

© О.М.Багно, 2014

деформації, тобто збурення деформацій, що виникають, значно менше початкових. Досліджуються гармонічні хвильові процеси малої амплітуди в пружних тілах, які знаходяться в початкову стані. Зауважимо, що на відміну від твердих тіл, співвідношення яких записані в лагранжевих координатах, рівності для рідкого середовища записуються в ейлерових координатах, які введені у природньому стані рідини. Варто підкреслити, що початковий стан пружного тіла при розгляді гідропружної задачі є природнім станом по відношенню до рідини та системи в цілому. Оскільки надалі досліджується розповсюдження малих збурень, то, як відомо, в цьому випадку підходи Ейлера та Лагранжа в описі поведінки середовищ співпадають. Тому надалі не робляться відмінності між лагранжевими та ейлеровими координатами і характерні для нелінійних задач труднощі при запису граничних умов при вказаних різних підходах не виникають.

Далі припустимо, що нелінійно-пружне тверде тіло, пружний потенціал якого є довільною двічі неперервно-диференційованою функцією компонент тензора деформацій Гріна, заповнює об'єм: $-\infty < z_1 < \infty$, $-h_2 \le z_2 \le 0$, $-\infty < z_3 < \infty$ та контактує з шаром ідеальної стисливої рідини, що займає об'єм: $-\infty < z_1 < \infty$, $0 \le z_2 \le h_1$, $-\infty < z_3 < \infty$. Будемо вважати, що зовнішні сили, які діють на зазначені середовища, розподілені рівномірно вздовж осі oz_3. У цьому випадку у всіх площинах, паралельних площині oz_1z_2, явища будуть відбуватися тотожнім чином. Тому задача буде плоскою і можна обмежитися вивченням процесу поширення хвиль у площині oz_1z_2.

Скористаємося постановками задач гідропружності для тіл з початковими напруженнями та представленнями загальних розв'язків, запропонованими в роботах [3-6]. У подальшому досліджуються хвильові процеси у попередньо деформованих стисливих пружних тілах, що взаємодіють з рідиною, початковий стан яких є однорідним.

Для плоского випадку, який розглядається, загальні розв'язки будуть мати вигляд [3-6]:

$$u_1 = -\frac{\partial^2 \chi_1}{\partial z_1 \partial z_2};\ v_1 = \frac{\partial^2 \chi_2}{\partial z_1 \partial t};\ v_2 = \frac{\partial^2 \chi_2}{\partial z_2 \partial t};$$

$$u_2 = \frac{\left(\lambda_1^2 a_{11} + s_{11}^0\right)}{\lambda_2^2\left(a_{12}+\mu_{12}\right)}\left[\frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + \frac{\lambda_2^2\left(\lambda_1^2\mu_{12} + s_{22}^0\right)}{\lambda_1^2\left(\lambda_1^2 a_{11} + s_{11}^0\right)}\frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - \right.$$

$$\left. - \frac{\rho}{\lambda_1^2\left(\lambda_1^2 a_{11} + s_{11}^0\right)}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right]\chi_1, \qquad (1)$$

де введені функції χ_1 та χ_2 задовольняють рівнянням:

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + \frac{\lambda_2^2\left(\lambda_1^2\mu_{12} + s_{22}^0\right)}{\lambda_1^2\left(\lambda_1^2 a_{11} + s_{11}^0\right)}\frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - \frac{\rho}{\lambda_1^2\left(\lambda_1^2 a_{11} + s_{11}^0\right)}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) *\right.$$

$$* \left(\frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + \frac{\lambda_2^2\left(\lambda_2^2 a_{22} + s_{22}^0\right)}{\lambda_1^2\left(\lambda_2^2\mu_{12} + s_{11}^0\right)}\frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - \frac{\rho}{\lambda_1^2\left(\lambda_2^2\mu_{12} + s_{11}^0\right)}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) -$$

$$\left. - \frac{\lambda_2^4\left(a_{12}+\mu_{12}\right)^2}{\left(\lambda_1^2 a_{11} + s_{11}^0\right)\left(\lambda_2^2\mu_{12} + s_{11}^0\right)}\frac{\partial^4}{\partial z_1^2 \partial z_2^2}\right]\chi_1 = 0 \qquad (2)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial {z_1}^2} + \frac{\partial^2}{\partial {z_2}^2} - \frac{1}{a_0^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right]\chi_2 = 0. \qquad (3)$$

Дана задача характеризується наступними динамічними

$$Q_1\Big|_{z_2=0} = 0,\ Q_2\Big|_{z_2=0} = P_2\Big|_{z_2=0},\ Q_1\Big|_{z_2=-h_2} = 0,$$

$$Q_2\Big|_{z_2=-h_2} = 0,\ P_2\Big|_{z_2=h_1} = 0 \qquad (4)$$

та кінематичною

$$v_2\Big|_{z_2=0} = \frac{\partial u_2}{\partial t}\Big|_{z_2=0} \qquad (5)$$

граничними умовами. Тут введені наступні позначення: u_i – компоненти вектора переміщень пружного тіла; λ_i – подовження пружного шару в напрямках координатних осей; a_{ij} та μ_{ij} – величини, які визначаються з рівнянь стану та залежать від виду пружного потенціалу [7]; $\overline{\sigma}_{ii}^{\,0}$ – початкові напруження ($s_{ii}^0 = \frac{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\overline{\sigma}_{ii}^{\,0}}{\lambda^2_i}$); ρ – щільність матеріалу пружного шару; v_i – компоненти вектора швидкості рідини; a_0 – швидкість звуку в рідині в стані спокою; Q_j та P_i – складові векторів напружень у твердому тілі та рідині.

Далі параметри, що характеризують процес поширення хвиль, розшукуються у класі біжучих хвиль, які обираються у вигляді:

$$\chi_j = X_j(z_2)\exp[i(kz_1 - \omega t)],\ \ j = 1,2, \qquad (6)$$

де k – хвильове число, ω – кругова частота.

Зауважимо, що обраний в роботі клас гармонічних хвиль, який є найбільш простим та зручним у теоретичних дослідженнях, не обмежує загальності отриманих результатів, оскільки лі-

нійна хвиля довільної форми, як відомо, може бути представлена набором гармонічних складових. Далі розглядаються дві задачі Штурма-Ліувілля на власні значення для рівнянь руху пружного тіла та рідини. Розв'язуючи їх знаходяться відповідні власні функції. Після підстановки розв'язків у граничні умови (4) – (5) отримуємо систему лінійних однорідних алгебраїчних рівнянь відносно сталих інтегрування. Виходячи з умови існування нетривіального розв'язку, та, прирівнюючи визначник системи до нуля, отримуємо дисперсійне рівняння

$$det\left\| e_{lm}\left(c_\sigma, a_{ij}, \mu_{ij}, s_{ii}^0, \rho_0, a_0, \omega h_1 / c_s, \omega h_2 / c_s\right)\right\| = 0, \quad l,m = \overline{1,6}, \qquad (7)$$

де c_σ – фазова швидкість нормальних хвиль у попередньо напруженому шарі, $c_s (c_s^2 = \mu/\rho)$ – швидкість хвилі зсуву, μ – модуль зсуву, h_2 – товщина пружного шару, h_1 – товщина шару рідини, ρ_0 – щільність рідини. Зауважимо також, що особливість розповсюдження збурень у гідропружному хвилеводі зазначеної структури обумовлена наявністю в пружному тілі та рідині граничних поверхонь. Це значно ускладнює картину хвильового поля у ньому. Причиною цього є те, що у формуванні поля в гідропружній системі суттєву роль відіграють не тільки наявність рідини, а також взаємодія хвиль з поверхнею пружного тіла, що контактує з рідким середовищем, але і наявність вільних границь та їх взаємовплив. Складна взаємодія хвиль, породжених граничними поверхнями, призводить до виникнення, так званих, квазіповерхневих мод.

Відмітимо, що отримане дисперсійне рівняння (7) не залежить від форми пружного потенціалу. Воно є найбільш загальним і з нього можна отримати ряд частинних випадків. Зокрема, якщо a_0 спрямувати до нескінченості, то (7) переходить у рівняння для визначення параметрів мод у випадку взаємодії з ідеальною нестисливою рідиною. При ρ_0=0 рівність (7) перейде в рівняння для визначення швидкостей хвиль Лемба [8]. Якщо додатково спрямувати h_2 до нескінченості, отримаємо співвідношення для визначення швидкостей поверхневих хвиль Релея [9]. При $\rho_0 \neq 0$ та $h_1 \to \infty$ рівність перейде у рівняння Стоунлі [10]. Вказані частинні випадки враховують наявність початкових деформацій у пружному шарі. Задачі, які було розглянуто в рамках цієї моделі, наведено в [2]. Якщо покласти $\bar{\sigma}_{ii}^{\,0}$=0, то отримаємо рівності для добре досліджених в рамках класичної теорії пружності хвиль Релея, Стоунлі та Лемба [1].

Аналіз чисельних результатів

У подальшому дисперсійне рівняння (7) розв'язувалося чисельно. При цьому числові розрахунки проводилися для системи оргскло – вода, яка характеризувалася наступними параметрами: пружний шар – ρ=1160 кг/м^3, μ=1,86*10^9 Па; шар рідини – ρ_0=1000 кг/м^3, a_0=1459,5 м/с. Зауважимо, що рівняння (7) виведено без будь-яких додаткових вимог до виду функції пружного потенціалу, тому воно має місце для пружних потенціалів довільної форми. При чисельній реалізації питання щодо вибору конкретної форми пружного потенціалу має самостійне й важливе значення і суттєвим чином може вплинути на кінцевий результат. Як показано у роботі [8], для попередньо напружених стисливих жорстких матеріалів (сталь, оргскло) закономірності, які спостерігаються експериментально, можуть бути правильно описані теоретично лише у рамках триінваріантних пружних потенціалів. У зв'язку з цим, у даній роботі для оргскла використовувався найпростіший триінваріантний потенціал у формі Мурнагана [7]. З урахуванням цього сталі Мурнагана для оргскла, через які визначаються величини рівнянь стану a_{ij} та μ_{ij}, обиралися такими [7, 8]:
a=–3,91*10^9 Па; *b*=–7,02*10^9 Па; c=–1,41*10^9 Па.

Результати обчислень представлені на малюнках 1–4. На Рис. 1 для пружного шару, який не взаємодіє з рідиною, приведено залежності безрозмірних величин фазових швидкостей $\bar{c}$ $(\bar{c} = \dfrac{c}{c_s})$ від безрозмірних величин товщини пружного шару $\bar{h}_2$ $(\overline{h_2} = \dfrac{\omega h_2}{c_s})$ при відсутності початкових деформацій. Номерами n_a позначено антисиметричні моди, а n_s - відповідно симетричні моди. На Рис. 2 представлені дисперсійні криві для гідропружного хвилеводу, які показують залежності безрозмірних фазових швидкостей від безрозмірної товщини шару рідини $\bar{h}_1$ $(\overline{h_1} = \dfrac{\omega h_1}{c_s})$ для пружного шару з товщиною рівною $\bar{h}_2$=10, теж при відсутності початкових деформацій. Характер впливу

попереднього розтягу $(\bar{\sigma}_{11}^{\,0} = 0{,}004)$ на швидкості мод у пружному шарі, який взаємодіє з шаром рідини, ілюструють графіки на Рис. 3 – 4, де представлені залежності відносних змін величин фазових швидкостей c_ε $(c_\varepsilon = \dfrac{c_\sigma - c}{c}$, c_σ – фазова швидкість нормальних хвиль у попередньо напруженому шарі, c – фазова швидкість нормальних хвиль у системі при відсутності початкових деформацій) від товщини шару рідини для перших 11 мод. На цих малюнках представлені дисперсійні криві для гідропружного хвилеводу, товщина пружного шару якого дорівнює $\bar{h}_2 = 10$.

З графіків, представлених на Рис. 1, випливає, що швидкість нульової антисиметричної моди при зростанні товщини пружного шару прямує до швидкості хвилі Релея знизу, а швидкість нульової симетричної моди прямує до швидкості хвилі Релея згори. Швидкості усіх вищих мод при збільшенні товщини пружного шару прямують до швидкості хвилі зсуву в матеріалі пружного тіла.

Графіки для гідропружної системи, які наведені на Рис. 2, для випадку товстого шару з $\bar{h}_2 = 10$ показують, що при зростанні товщини рідкого шару швидкість нульової антисиметричної моди прямує до швидкості хвилі Стоунлі, а швидкість нульової симетричної моди - до швидкості хвилі Релея. При збільшенні товщини рідкого шару швидкість першої антисиметричної моди прямує до швидкості хвилі, величина якої менше швидкості поширення звуку в рідині. Фазові швидкості усіх інших вищих мод прямують до швидкості поширення звуку в рідині.

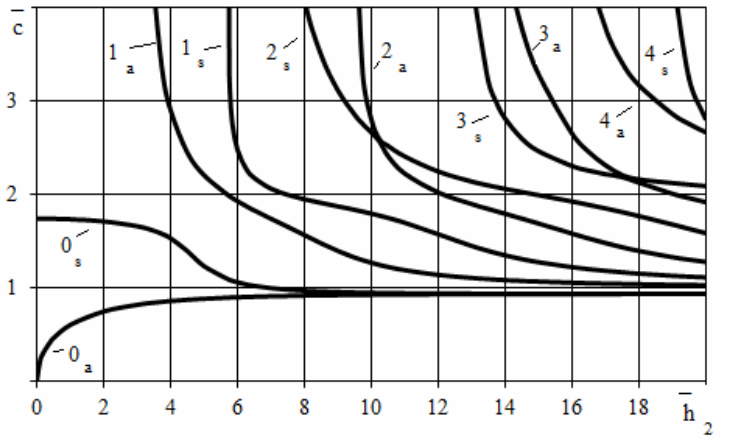


Рис. 1 Залежності фазових швидкостей мод від товщини пружного шару за відсутності початкових напружень

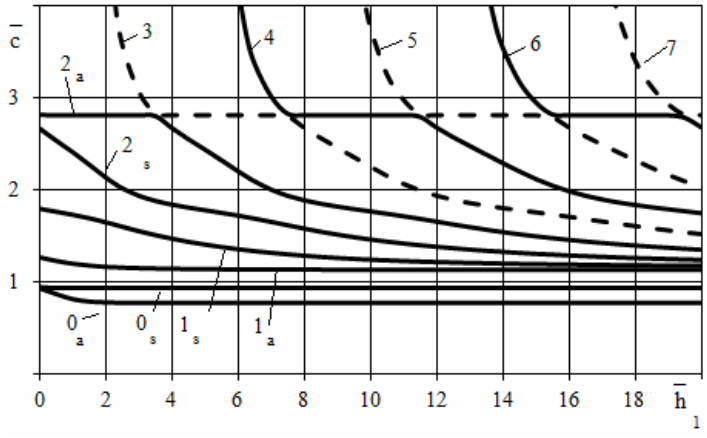


Рис. 2 Залежності фазових швидкостей мод від товщини шару рідини за відсутності початкових напружень

З графіків, зображених на Рис. 3-4, випливає, що початковий розтяг пружного шару призводить до підвищення фазових швидкостей нульової і першої антисиметричної та симетричної мод, а також другої антисиметричної моди. Швидкості усіх вищих мод 3–7, які породжені

шаром рідини, в околі частот їх зародження стають менше відповідних швидкостей в шарі без початкових напружень. Вплив початкового розтягу на фазові швидкості усіх мод із збільшенням товщини шару рідини зменшується. Неважко бачити, що для мод, починаючи з другої, і далі для всіх наступних існують товщини рідкого шару та певні частоти, при яких попереднє деформування не впливає на їх фазові швидкості. Ця якісно нова закономірність, яка відсутня у випадку поширення хвиль у необмежених та напівобмежених тілах, вперше була виявлена для пружного шару, що не взаємодіє з рідиною, та опублікована в роботі [8]. У розглянутому тут випадку товстого пружного шару кожна мода 3 - 7, яка породжена рідиною, має три такі частоти. З представлених графіків випливає також, що для окремих діапазонів частот попередній розтяг пружного шару може призводити як до підвищення, так і до зменшення величин фазових швидкостей хвиль.

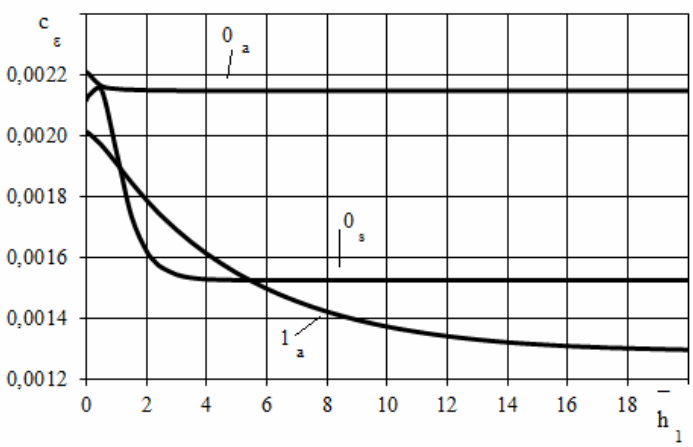


Рис. 3 Залежності відносних змін фазових швидкостей мод 0_a, 0_s та 1_a від товщини шару рідини при дії початкового розтягу

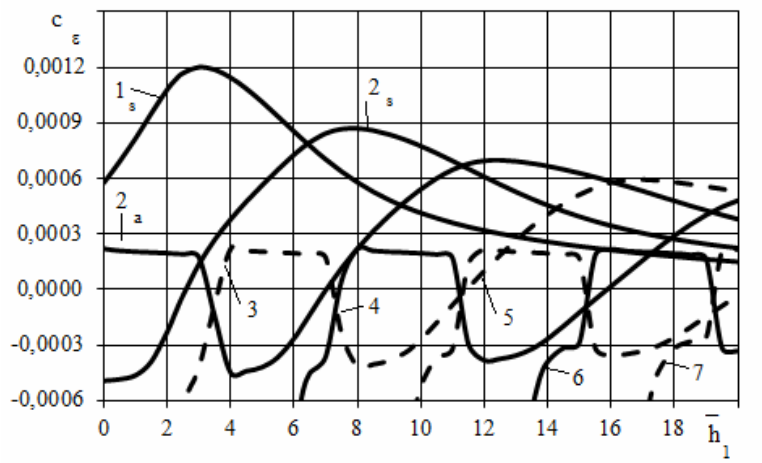


Рис. 4 Залежності відносних змін фазових швидкостей мод 1_s – 7 від товщини шару рідини при дії початкового розтягу

Висновки

У рамках тривимірних рівнянь лінеаризованої теорії пружності при скінчених деформаціях дано постановку задачі про поширення акустичних хвиль у попередньо деформованому стисливому пружному шарі, що взаємодіє з шаром ідеальної стисливої рідини. Проаналізовано вплив товщини шару рідини та початкової деформації пружного шару на фазові швидкості нормальних мод. Приведені дисперсійні лінії для мод у широкому інтервалі частот. Показано, що для мод, починаючи з другої, і далі для всіх наступних існують товщини рідкого шару або певні частоти, при яких попереднє деформування не впливає на їх фазові швидкості. Виявлено, що

у розглянутому тут випадку товстого пружного шару кожна мода, яка породжена рідиною, має три такі частоти. З чисельного дослідження випливає також, що для окремих діапазонів частот попередній розтяг пружного шару може призводити як до підвищення, так і до зменшення величин фазових швидкостей хвиль.

Список використаних джерел

1. *Викторов И.А.* Звуковые поверхностные волны в твердых телах / И.А. Викторов - М.: Наука, 1981. - 288 с.
2. *Багно А.М.* Упругие волны в предварительно напряжённых телах, взаимодействующих с жидкостью (Обзор) / А.М. Багно, А.Н. Гузь // Прикладная механика. - 1997. - **33**, № 6. - С. 3-39.
3. *Гузь А.Н.* О задачах аэрогидроупругости для тел с начальными напряжениями / А.Н. Гузь // Прикладная механика. - 1980. - **16**, № 3. - С. 3-21.
4. *Гузь А.Н.* Упругие волны в телах с начальными напряжениями: в 2 т. / А.Н. Гузь - К.: Наук. думка, 1986.
   Т. 1: Общие вопросы. - 376 с.
   Т. 2: Закономерности распространения. - 536 с.
5. *Гузь А.Н.* Динамика сжимаемой вязкой жидкости / А.Н. Гузь - К.: А.С.К., 1998. - 350 с.
6. *Гузь А.Н.* Упругие волны в телах с начальными (остаточными) напряжениями / А.Н. Гузь - К.: А.С.К., 2004. - 672 с.
7. *Гузь А.Н.* Введение в акустоупругость / А.Н. Гузь, Ф.Г. Махорт, О.И. Гуща - К.: Наук. думка, 1977. - 152 с.
8. *Гузь А.Н.* Волны в слое с начальными напряжениями / А.Н. Гузь, А.П. Жук, Ф.Г. Махорт - К.: Наук. думка, 1976. - 104 с.
9. *Бабич С.Ю.* Упругие волны в телах с начальными напряжениями / С.Ю. Бабич, А.Н. Гузь, А.П. Жук // Прикладная механика. - 1979. - **15**, № 4. - С. 3 - 23.
10. *Жук А.П.* Волны Стонли в среде с начальными напряжениями / А.П. Жук // Прикладная механика. - 1980. - **16**, № 1. - С. 113 - 116.

References

1. VIKTOROV, I.A. (1981) *Zvukovye poverkhnostnye volny v tverdykh telakh.* Moskva: Nauka.
2. BAHNO, A.M. and HUZ, A. N. (1997) Upruhie volny v predvaritelno napriazhennykh telakh, vzaimodeistvuiushchikh s zhidkostiu (Obzor). *International Applied Mechanics*. 33 (6). P. 3-39.
3. HUZ, A.N. (1980) O zadachakh aerohidroupruhosti dlia tel s nachalnymi napriazheniiami. *International Applied Mechanics,* 16 (3). p. 3-21.
4. HUZ, A.N. (1986) *Upruhie volny v telakh s nachalnymi napriazheniiami. V 2-kh tomakh*. Kiev: Naukova dumka.
5. HUZ, A.N. (1998) *Dinamika szhimaemoi viazkoi zhidkosti.* Kiev: A.S.K.
6. HUZ, A.N. (2004) *Upruhie volny v telakh s nachalnymi (ostatochnymi) napriazheniiami.* Kiev: A.S.K.
7. HUZ, A.N., MAKHORT, F.H. and HUSHCHA, O.I. (1977) *Vvedenie v akustoupruhost.* Kiev: Naukova dumka.
8. HUZ, A.N., ZHUK, A.P. and MAKHORT, F.H. (1976) *Volny v sloe s nachalnymi napriazheniiami.* Kiev: Naukova dumka.
9. BABICH, S. Y., HUZ, A.N. and ZHUK, A.P. (1979) Upruhie volny v telakh s nachalnymi napriazheniiami. *International Applied Mechanics,* 15 (4). p. 3-23.
10. ZHUK, A.P. (1980) Volny Stonli v srede s nachalnymi napriazheniiami. *International Applied Mechanics,* 16 (1). p. 113-116.

Надійшла до редколегії 25.06.14.

УДК 519.9

Вовк І. В. [1], д. ф.-м. н., проф.,
Маципура В. Т. [2], д. ф.-м. н., проф.,
Трунов О. О.[2], аспірант

Поширення хвилі у криволінійному хвилеводі з різкою зміною ширини вигину

[1] Інститут гідромеханіки НАН України, 03057, м. Київ, вул. Желябова, 8/4.
[2] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, просп. Глушкова, 4е, e-mail: mnivtt@gmail.com

I. V. Vovk[1], Doctor of physical and mathem., prof.,
V. T. Matsipura [2], Doctor of physical and mathem., prof.,
O. O. Trunov[2], graduate student

The wave propagation in bent waveguide with thickened bend

[1] Institute of Hydromechanics of NAS Ukraine, 03057, Kyiv, Zhelyabova St., 8/4.
[2] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova St., 4e, e-mail: mnivtt@gmail.com

Розглянута плоска задача про поширення хвилі в криволінійному хвилеводі з різкою зміною ширини вигину. Геометричні розміри хвилеводу порівнянні з довжиною хвилі. Досліджено залежність енергетичного коефіцієнта проходження хвилею зони вигину в залежності від хвильового розміру та кута розкриву криволінійної частини хвилеводу.
Ключові слова: криволінійний хвилевід, моди хвилеводу, коефіцієнт проходження.

In present article the plane problem of wave propagation in the waveguide with thickened bend was considered. The problem using the method of boundary regions was solved. The pressure field in the waveguide with hard boundaries was determined. The infinite system of algebraic equations from matching condition was determined and using method of reduction was solved. Calculation of energy transmission coefficient through the bend and coefficients of excitation of the modes beyond the bend in the waveguide depending on geometrical parameters of the waveguide was done. Obtained result fulfillment of matching condition and law of energy conservation was checked. Dimensions of the waveguide are proportional to the wave length. The mode structure beyond the bend depends strongly on inner radius, outer radius, width of the regular waveguide and angle of the bend. At certain combinations of these parameters is the dominance of one of the waveguide modes. Two representations of wave mode structure in the bend were used in current article. Calculated fields in the waveguide using both representations are equal.
Key words: the waveguide with the bend, normal wave, boundary conditions.

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Жук Я.О.

Вступ

Конструктивні елементи у вигляді криволінійних хвилеводів часто зустрічаються в пристроях, де має місце поширення акустичних або електромагнітних хвиль, тому інтерес до дослідження поля в них не слабшає [1, 3]. Значний внесок в розв'язування даної задачі внесли спеціалісти в області електродинаміки. В силу специфіки електромагнітних хвилеводів зацікавленість тут викликає високочастотна область [2]. В статті [3] розглянуто задачу про поширення хвилі в акустичному хвилеводі, який складається з двох плоскопаралельних хвилеводів, з'єднаних криволінійною областю. При цьому ширина хвилеводу була незмінною. Продовжуючи цю тематику, в даній роботі розглядається хвилевід з різкою зміною ширини хвилеводу в зоні вигину. Геометричні розміри хвилеводу порівняні з довжиною хвилі.

Постановка та побудова розв'язку задачі

Розглянемо плоску задачу про поширення хвилі у хвилеводі, який складається з двох плоскопаралельних хвилеводів, з'єднаних криволінійною областю. При цьому в зоні вигину має місце різка зміна ширини вигину, рис. 1.

Для опису задачі введемо три системи координат: дві декартові (x, y), (x', y') і полярну (r, φ) з загальним центром у точці O. Радіуси

© І.В. Вовк, В.Т. Маципура, О.О. Трунов, 2014

поверхонь криволінійної ділянки хвилеводу позначені r_1 та r_3. Ширина хвилеводу в областях I та III залишається сталою і дорівнює $h = r_2 - r_1$, ширина криволінійної області $H = r_3 - r_1$. Кут розкриття криволінійної частини хвилеводу позначений як φ_0. Всі поверхні хвилеводу будемо вважати акустично жорсткими. Хвилевід наповнений ідеальною рідиною, яка має густину ρ та швидкість звуку c. Дана задача, з необхідною заміною параметрів, що визначають хвильовий рух, аналогічна задачі про поширення SH-хвиль в твердому хвилеводі.

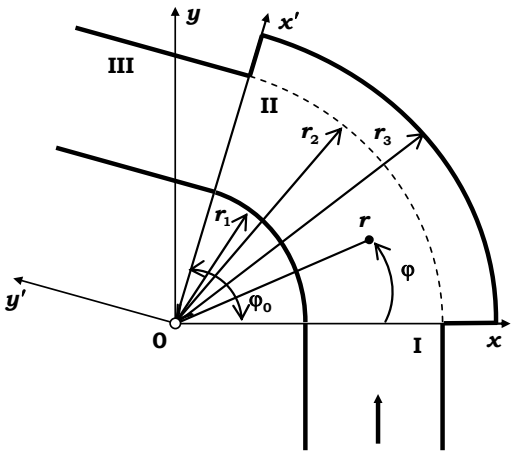


Рис. 1. Геометрія хвилеводу

Природнім чином вся область існування звукового поля розбивається на три області: області I та III – плоскопаралельні хвилеводи, область II – ділянка хвилеводу з криволінійними поверхнями. Нехай в області I в додатному напрямку вісі Oy поширюється гармонічна з частотою ω m-та мода хвилеводу. Тоді поля в областях I і III запишемо у вигляді суперпозиції відповідних мод плоскопаралельного хвилеводу:

$$p_{\mathrm{I}} = \cos\left(\alpha_m\left(x - r_1\right)\right)\exp\left(i\gamma_m y\right) + \\ + \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cos\left(\alpha_n\left(x - r_1\right)\right)\exp\left(-i\gamma_n y\right), \quad (1)$$

$$p_{\mathrm{III}} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \cos\left(\alpha_n\left(x' - r_1\right)\right)\exp\left(i\gamma_n y'\right), \quad (2)$$

де $\alpha_n = n\pi/h$, $\gamma_n = \sqrt{k^2 - \alpha_n^2}$, $k = \omega/c$. Часового множника $\exp\left(-i\omega t\right)$ не пишемо.

Поле в області II запишемо у вигляді суперпозиції мод криволінійної області II [1, 3]

$$p_{\mathrm{II}} = \sum_{n=0}^{\infty} R_n\left(kr\right) \cdot \\ \cdot\left[C_n \exp\left(i\nu_n\varphi\right) + D_n \exp\left(i\nu_n\left(\varphi - \varphi_0\right)\right)\right], \quad (3)$$

де власні форми мод

$$R_n\left(kr\right) = J_{\nu_n}\left(kr\right) - \frac{J'_{\nu_n}\left(kr_3\right)}{Y'_{\nu_n}\left(kr_3\right)} Y_{\nu_n}\left(kr\right), \quad (4)$$

тут $J_\nu\left(kr\right)$ і $Y_\nu\left(kr\right)$ – функції Бесселя першого та другого роду. Штрих при функції Бесселя означає похідну по повному аргументу.

Умови спряження полів на межах поділу часткових областей мають вигляд

$$p_{\mathrm{I}} = p_{\mathrm{II}}, \quad x = \left[r_1, r_2\right], \quad y = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial p_{\mathrm{II}}}{r\partial\varphi} = \begin{cases} \dfrac{\partial p_{\mathrm{I}}}{r\partial\varphi}, & r = \left[r_1, r_2\right], \quad \varphi = 0, \\ 0, & r = \left[r_2, r_3\right], \quad \varphi = 0, \end{cases} \quad (6)$$

$$p_{\mathrm{II}} = p_{\mathrm{III}}, \quad x' = \left[r_1, r_2\right], \quad y' = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial p_{\mathrm{II}}}{r\partial\varphi} = \begin{cases} \dfrac{\partial p_{\mathrm{III}}}{r\partial\varphi}, & r = \left[r_1, r_2\right], \quad \varphi = \varphi_0, \\ 0, & r = \left[r_2, r_3\right], \quad \varphi = \varphi_0, \end{cases} \quad (8)$$

Підставивши вирази (1)-(4) в умови (5)-(8), отримаємо функціональну систему рівнянь. Далі проводимо стандартну процедуру переходу від функціональної до алгебраїчної системи рівнянь [4], використовуючи властивості повноти і ортогональності відповідного набору функцій: $\cos\left(\alpha_n\left(x - r_1\right)\right)$ для рівняння (5), $\cos\left(\alpha_n\left(x' - r_1\right)\right)$ – для рівняння (7), $R_n\left(kr\right)$ – для рівнянь (6) та (8). Як результат, приходимо до нескінченної системи лінійних алгебраїчних рівнянь другого роду відносно невідомих коефіцієнтів A_n, B_n, C_n, D_n. Нескінченна система рівнянь розв'язувалася методом редукції. Достовірність отриманого розв'язку перевірялась виконанням умов спряження полів на межах часткових областей I, II та II, III, а також перевіркою виконання закону збереження енергії в процесі поширення хвилі у хвилеводі.

Зазначимо, що у всіх проведених нижче розрахунках умови спряження полів виконувалися з високою точністю. Криві, що визначають поле тиску, з графічною точністю збігалися. Для коливальної швидкості, в околі кутових точок ($r = r_2$; $\varphi = 0$, $\varphi = \varphi_0$), збіжність кривих була менша. Але особливість швидкості біля кутових точок має локальний характер і не впливає на енергетичні характеристики [4]. Закон збереження енергії виконувався з точністю до четвертого знаку після коми.

Представлення поля в області III у вигляді суперпозиції нормальних мод криволінійного хвилеводу (3) не є єдиним. Можливо також

представлення поля у вигляді суми часткових розв'язків рівняння Гельмгольця в різних системах координат:

$$p_{\text{II}} = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \cos\left(\alpha_n (x - r_1)\right) \exp\left(i\gamma_n y\right) +$$

$$+ \sum_{n=0}^{\infty} D_n \cos\left(\alpha_n (x' - r_1)\right) \exp\left(-i\gamma_n y'\right) + \qquad (9)$$

$$+ \sum_{n=0}^{\infty} E_n \cos\left(\beta_n \varphi\right) \frac{J_{\beta_n}(kr)}{J'_{\beta_n}(kr_3)} + \sum_{n=0}^{\infty} F_n \cos\left(\beta_n \varphi\right) \frac{Y_{\beta_n}(kr)}{Y'_{\beta_n}(kr_1)},$$

де $\beta_n = n\pi / \varphi_0$. Перші дві суми в формулі (9) дозволяють задовольнити умовам спряження полів на межах часткових областей I, II та II, III. Також слід задовольнити граничні умови на жорстких поверхнях криволінійної області II, $r = r_1$ та $r = r_2$, $\varphi = [0, \varphi_0]$. За це відповідають третя та четверта суми в формулі (9).

Аналіз чисельних результатів

Енергетичний коефіцієнт проходження $W^{(m)}$ m-ої моди можна записати у вигляді [4]

$$W^{(m)} = \sum_{n=0}^{N_3} W_n^{(m)}, \quad W_n^{(m)} = \left|B_n\right|^2 \cdot \frac{\varepsilon_n \operatorname{Re}(\gamma_n)}{\varepsilon_m \operatorname{Re}(\gamma_m)}, \quad (10)$$

де $\varepsilon_0 = 1$, $\varepsilon_n = 0{,}5$, $n > 0$. Число доданків N_3 дорівнює кількості однорідних хвиль області III.

Зосередимо нашу увагу на випадку, коли в області I набігає нульова мода ($m = 0$). На рис. 2 представлені залежності енергетичного коефіцієнту проходження (зліва) від кута розкриву φ_0 області II при різних значеннях внутрішнього радіусу округлення, а саме $r_1 / \lambda = 1$ та $r_1 / \lambda = 0{,}2$. Хвильова ширина хвилеводу в областях I і III становить $h / \lambda = 1{,}1$, тобто в цих областях маємо три однорідні моди. Хвильова ширина зони вигину $H / \lambda = 1{,}8$. Як бачимо, характер залежності $W^{(0)}$ від кута φ_0 практично не змінився незважаючи на те, що внутрішній радіус округлення r_1 у двох випадках відрізняється у п'ять разів. Зазначимо, що у випадку сталої ширини хвилеводу, тобто за відсутності різкої зміни ширини зони вигину, коефіцієнт проходження практично дорівнює одиниці для усіх кутів розкриву φ_0. На рис. 2 праворуч показані відповідні залежності коефіцієнтів збурення $W_n^{(0)}$ мод області III. Порівнюючи графіки на рис. 2 зліва та праворуч можна сказати, що значення коефіцієнту проходження $W^{(0)}$ має значну величину, навіть близьку до одиниці, коли в області III домінуючою є нульова мода. Домінування вищих мод в області III супроводжується зниженням коефіцієнту проходження.

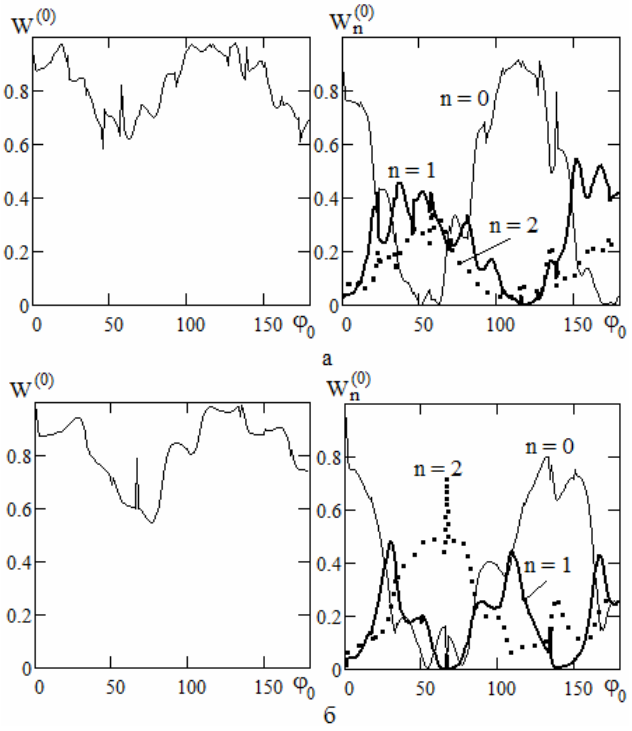


Рис. 2. Залежності енергетичних коефіцієнтів проходження $W^{(0)}$ (зліва) і збудження мод області III $W_n^{(0)}$ (праворуч) від кута розкриву φ_0; $h / \lambda = 1{,}1$, $H / \lambda = 1{,}8$: а – $r_1 / \lambda = 1$, б – $r_1 / \lambda = 0{,}2$

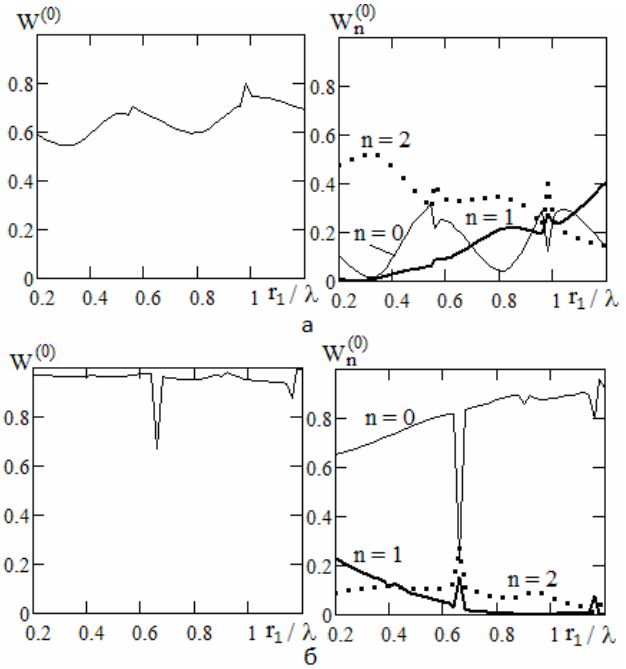


Рис. 3. Залежності енергетичних коефіцієнтів проходження $W^{(0)}$ (зліва) і збудження мод області III $W_n^{(0)}$ (праворуч) від r_1 / λ, $h / \lambda = 1{,}1$, $H / \lambda = 1{,}8$: а – $\varphi_0 = 70^\circ$, б – $\varphi_0 = 120^\circ$

На рис. 3 представлені подібні залежності де змінною величиною є радіус округлення r_1/λ. Рис. 3 *а* відповідає куту $\varphi_0 = 70^\circ$, а рис. 3 *б* – $\varphi_0 = 120^\circ$. Вибрані кути належать тим інтервалам зміни кута φ_0 на рис. 2, де має місце зниження та зростання коефіцієнта проходження. Як бачимо, загальна тенденція зберігається: на рис. 3 *б* значення коефіцієнта $W^{(0)}$ близькі до одиниці, при цьому в області III домінує нульова мода. Напроти, на рис. 3 *а* коефіцієнт $W^{(0)}$ має менші значення і відповідно внесок вищих мод в області III є вагомим.

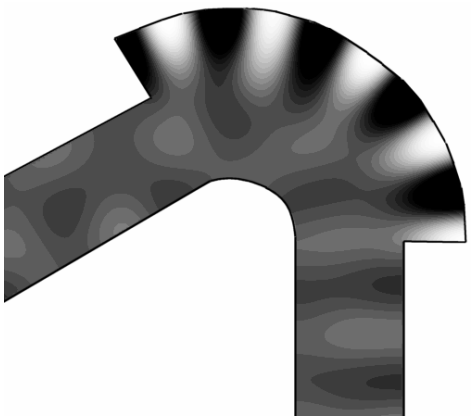


Рис. 4. Поле тиску в області вигину, $\varphi_0 = 120^\circ$, $h/\lambda = 1{,}1$, $H/\lambda = 1{,}8$, $r_1/\lambda = 0{,}66$

Слід відзначити, що значення коефіцієнта $W^{(0)}$ на рис. 3, в діапазоні зміни r_1/λ, досить стабільні. Виключенням є суттєве зниження величини $W^{(0)}$ на рис. 3 *б* при $r_1/\lambda = 0{,}66$. Очевидно, дана ситуація пов'язана з явищем просторового резонансу, який має місце в області вигину хвилеводу. Таку думку підтверджує рис. 4, де у відтінках сірого кольору показано поле тиску в області вигину та його околі для даної ситуації. Тут чорний колір відповідає мінімуму тиску в зоні розрідження, а білий колір – максимуму в зоні стиснення. Як бачимо на зовнішній стінці зони вигину чергуються області стиснення і розрідження, утворюючи своєрідну стоячу хвилю. Причому максимум амплітуди переважає амплітуду хвилі, що набігає в області I, у 15 разів.

Можна стверджувати, що зміна хвильової ширини H/λ та кута розкриву φ_0 зони вигину буде приводити до різких змін в частотній характеристиці коефіцієнта проходження. Така ситуація обумовлена резонансними явищами, які виникають в області II, коли геометричні розміри зони вигину стають приблизно пропорційні половині довжини хвилі.

Висновки

1. Побудовано розв'язок плоскої задачі поширення хвилі у хвилеводі, який складається з двох плоскопаралельних хвилеводів, з'єднаних областю вигину з різкою зміною ширини.

2. Показано, що енергетичний коефіцієнт проходження нульовою модою зони вигину залежить від кута розкриву області II φ_0. При цьому значення коефіцієнту проходження суттєво залежить від наявності однорідних мод в області за вигином. Так, у випадку домінування нульової моди, маємо великі значення коефіцієнту проходження. Якщо ж домінують вищі моди, то коефіцієнт проходження зменшується.

3. Показано, що в частотній характеристиці коефіцієнту проходження можливі різки зміни. Це пов'язано з тим, що область вигину, на певних частотах, поводить себе як об'ємний резонатор.

Список використаних джерел

1. *Cochran J. A.* Mode propagation in continuously curved waveguides / *J. A. Cochran, R. G. Pecina.* – Radio science, 1966. – **34**. – 679-696 p.

2. *Horvat M.* The bends on quantum waveguide and cross-products of Bessel functions/*M. Horvat, T. Prosen.* - J. Phys. A.: Math. Gen. – 2007. – **1**. – 34 p.

3. Трунов О.О. Хвильове поле у хвилеводі з вигином / О.О. Трунов // Вісник Київського національного університету ім.Тараса Шевченка. Сер:фіз.-мат. науки. – 2014. – №2. – 83 – 86 с.

4. Гринченко В.Т. Волновые задачи акустики / В.Т. Гринченко, И.В. Вовк, В.Т. Мацыпура. – Киев: Интерсервис, 2013. –572 с.

References

1. *COCHRAN J. A.*, *PECINA R. G.* (1966) Mode propagation in continuously curved waveguides. Radio science, **34**. pp. 679-696.

2. *HORVAT M., PROSEN T.* (2007) The bends on quantum waveguide and cross-products of Bessel functions, J. Phys. A.: Math. Gen. **1**. – 34 p.

3. TRUNOV O.O. (2014) A wave field in a waveguide with a bend. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kiev, series Physics & Mathematics*. №2. – 83 – 86 p.

4. GRINCHENKO, V.T., VOVK, I.V. and MATSIPURA, V.T. (2013) Volnovyie zadachi ackustyki. Kiev: Interservis.

Надійшла до редколегії 28.08.14

УДК 519.9

Вовк І. В. [1], д. ф.-м. н., проф.,
Маципура В. Т. [2], д. ф.-м. н., проф.,
Трунова Л.А. [2], аспірантка

Точкове джерело в околі хрестоподібного відбивача

[1] Інститут гідромеханіки НАН України, 03057, м. Київ, вул. Желябова, 8/4.
[2] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, просп. Глушкова, 4е, e-mail: mnivtt@gmail.com

I. V. Vovk[1], Doctor of physical and mathem., prof.,
V. T. Matsipura [2], Doctor of physical and mathem., prof.,
L.A. Trunova[2], graduate student

Point source in the vicinity of the cross-shaped reflector

[1] Institute of Hydromechanics of NAS Ukraine, 03057, Kyiv, Zhelyabova St., 8/4.
[2] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova St., 4e, e-mail: mnivtt@gmail.com

Розглянута плоска задача взаємодії точкового джерела з відбивачем скінченних розмірів у вигляді перетину двох плоских поверхонь. Розміри відбивача порівнянні з довжиною хвилі. Проведено дослідження характеристик дальнього поля джерела в залежності від хвильового розміру хрестоподібного відбивача і положення джерела.

Ключові слова: характеристика направленості, амплітуда тиску, точкове джерело.

The plane problem of interaction between a point source and reflector of finite size was considered. The research of the characteristics of the radiation field of cross-shaped antenna depending on its parameters, namely geometry of antenna and location of the source was conducted. The pressure field near reflector with hard boundaries was determined. The problem using the method of boundary regions was solved. Dimensions of reflector are proportional to the wavelength. The conditions of coupling fields on the boundaries of partial regions and conservation of power flow through the circle surrounding the source, by changing the radius of the circle, were verified. Directional diagram of the radiation point sources in the vicinity of the cross-shaped reflector was shown. The non-directional point source in the vicinity of the cross-shaped reflector acquires the properties of broadband antenna. Far field characteristics of the source, placed near the center of the cross-shaped reflector, remain stable within some frequency range. Obtained characteristics confirm the possibility of using cross-shaped reflector with four electroacoustic transducers as an antenna for practical application in hydro acoustic technology.

Key words: characteristic direction, the amplitude of pressure, point source.

Статтю представив д. ф.-м. н., професор Жук Я.О.

Вступ

В роботі [1] розглянута задача про визначення поля точкового гармонічного джерела, розташованого на осі кутикового відбивача (кутикової антени), розміри якого порівнянні з довжиною хвилі. Досліджувалося поле кутикової антени в залежності від її параметрів, а саме, геометрії куточка та місця розташування джерела. В даній статті, продовжуючи зазначену в [1] тематику, розглянемо групу точкових джерел, які розташовані в околі відбивача скінченних розмірів, котрий утворено перетином під прямим кутом двох площин, рис. 1. Такий відбивач назвемо "хрестоподібним", або просто "хрестик". Розмір сторони хрестика дорівнює a. Джерела (наприклад, електроакустичні перетворювачі малих хвильових розмірів) розташовані на відстані R від центру хрестика O під кутами

$$\theta_j = \pi/4 + (\pi/2)(j-1), \quad j = 1,2,3,4.$$

Індекс j визначає номер джерела, він співпадає з номером часткової області в якій знаходиться джерело, рис. 1. Така, проста за свою ідеєю антена, може бути використана, наприклад, в конструкції гідроакустичного буя. При цьому можливі два варіанти її застосування. Перший, коли антена працює в пасивному режимі і з кожним перетворювачем пов'язаний свій приймальний тракт. У другому варіанті, антена працює в активно-пасивному режимі. Спочатку, при однаково-

© І. В. Вовк, В. Т. Маципура, Л. А. Трунова, 2014

му збудженні усіх перетворювачів імпульсним сигналом, створюється ненаправлене звукове поле. Далі слідує пауза, на протязі якої перетворювачі працюють в режимі прийому кожний зі своїм приймальним трактом. Такий пристрій дає можливість не тільки визначити наявність джерела звуку, але й оцінити його напрям (пеленг).

Постановка та побудова розв'язку задачі

Розглянемо плоску задачу випромінювання точкового джерела, котре розташоване в околиці хрестоподібного відбивача скінченних розмірів, рис. 1. Для опису геометрії відбивача та побудови розв'язку задачі, введемо полярну систему координат $rO\theta$. Джерело створює гармонічну циліндричну хвилю із частотою ω. Будемо вважати, що поверхні хрестика акустично жорсткі, а сам відбивач занурений в ідеальне акустичне середовище з густиною ρ і швидкістю звуку c. Згідно методу часткових областей [2] весь простір існування звукового поля природно ділиться на п'ять областей (рис. 1): I, II, III, IV – чотири прямокутні сектори V – зовнішність кола радіуса a, тобто $r \ge a$, $\theta = [0, 2\pi]$.

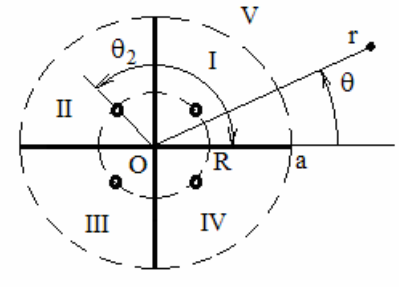


Рис. 1. Геометрія антени

Нехай точкове джерело знаходиться в області I. Зрозуміло, що інші джерела утворюють поля подібні до поля першого джерела з відповідною орієнтацією у просторі. Поле в області I представимо у вигляді суми двох доданків, однин з них є поле джерела $p_0^{(1)}$ у клиноподібній області, а другий – суперпозиція, підібраних відповідно до граничних умов на сторонах хрестика, стоячих хвиль:

$$p_{\text{I}} = p_0^{(1)} + \sum_{n=0}^{\infty} C_n \frac{J_{\alpha_n}(kr)}{J'_{\alpha_n}(ka)} \cos(\alpha_n \theta), \qquad (1)$$

де $J_\alpha(kr)$ – функція Бесселя. Штрих при функції Бесселя визначає похідну по повному аргументу. Значення α_n визначаються з граничних умов на жорстких поверхнях хрестика, тому $\alpha_n = 2n$. Часового множника $\exp(-i\omega t)$ не пишемо.

Поля в областях II, III, IV мають подібний вигляд і представляються як суперпозиції відповідного набору стоячих хвиль

$$p_{\text{II}} = \sum_{n=0}^{\infty} D_n \frac{J_{\alpha_n}(kr)}{J'_{\alpha_n}(ka)} \cos\left(\alpha_n\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)\right), \quad (2)$$

$$p_{\text{III}} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \frac{J_{\alpha_n}(kr)}{J'_{\alpha_n}(ka)} \cos(\alpha_n(\theta - \pi)), \quad (3)$$

$$p_{\text{IV}} = \sum_{n=0}^{\infty} F_n \frac{J_{\alpha_n}(kr)}{J'_{\alpha_n}(ka)} \cos\left(\alpha_n\left(\theta - \frac{3\pi}{2}\right)\right). \quad (4)$$

Поле в області V запишемо у вигляді суперпозиції біжучих циліндричних хвиль з кутовою залежністю у вигляді функцій $\cos(n\theta)$ та $\sin((n+1)\theta)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$

$$p_V = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \frac{H_n^{(1)}(kr)}{H_n^{(1)\prime}(ka)} \cos(n\theta) + \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{H_{n+1}^{(1)}(kr)}{H_{n+1}^{(1)\prime}(ka)} \sin((n+1)\theta), \qquad (5)$$

де $H_n^{(1)}(kr)$ – функція Ханкеля.

Поле джерела, що розташоване в області I, має вигляд [2, 3]:

$$p_0^{(1)}(r, \theta; R, \theta_1) = \begin{cases} iP_0 \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n T_n K_n^{(1)}, & r < R, \\ iP_0 \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n G_n K_n^{(1)}, & R < r < a, \end{cases} \qquad (6)$$

де $T_n = J_{\alpha_n}(kr) H_{\alpha_n}^{(1)}(kR)$, $G_n = J_{\alpha_n}(kR) H_{\alpha_n}^{(1)}(kr)$, $K_n^{(1)} = \cos(\alpha_n \theta_1)\cos(\alpha_n \theta)$, r, θ – координати точки спостереження, R, θ_1 – координати джерела в області I, $\varepsilon_0 = 1$, $\varepsilon_n = 2$, $n > 0$, P_0 – амплітуда тиску, надалі покладемо її рівній одиниці.

Умови спряження полів на межі часткових областей V і I, II, III, IV (рис. 1) мають вигляд

$$\frac{\partial p_{\text{V}}}{\partial r} = \begin{cases} \frac{\partial p_{\text{I}}}{\partial r}, & r = a, \ \theta = [0, \pi/2], \\ \frac{\partial p_{\text{II}}}{\partial r}, & r = a, \ \theta = [\pi/2, \pi], \\ \frac{\partial p_{\text{III}}}{\partial r}, & r = a, \ \theta = [\pi, 3\pi/2], \\ \frac{\partial p_{\text{IV}}}{\partial r}, & r = a, \ \theta = [3\pi/2, 2\pi], \end{cases} \qquad (7)$$

$$p_{\text{V}} = p_{\text{I}}, \ r = a, \ \theta = [0, \pi/2], \qquad (8)$$

$$p_{\text{V}} = p_{\text{II}}, \ r = a, \ \theta = [\pi/2, \pi], \qquad (9)$$

$$p_{\mathrm{V}} = p_{\mathrm{III}},\ r = a,\ \theta = [\pi, 3\pi/2], \qquad (10)$$

$$p_{\mathrm{V}} = p_{\mathrm{IV}},\ r = a,\ \theta = [3\pi/2, 2\pi]. \qquad (11)$$

Підставивши вирази (1)-(6) в умови (7)-(11), одержимо функціональну систему рівнянь. Далі проводимо стандартну процедуру переходу від функціональної до алгебраїчної системи рівнянь [2], використовуючи властивості повноти та ортогональності відповідного набору функцій у виразах (1)-(6). У результаті одержимо нескінченну систему лінійних алгебраїчних рівнянь другого роду відносно невідомих коефіцієнтів A_n, B_n, C_n, D_n, E_n, F_n. Нескінченна система рівнянь розв'язувалася методом редукції.

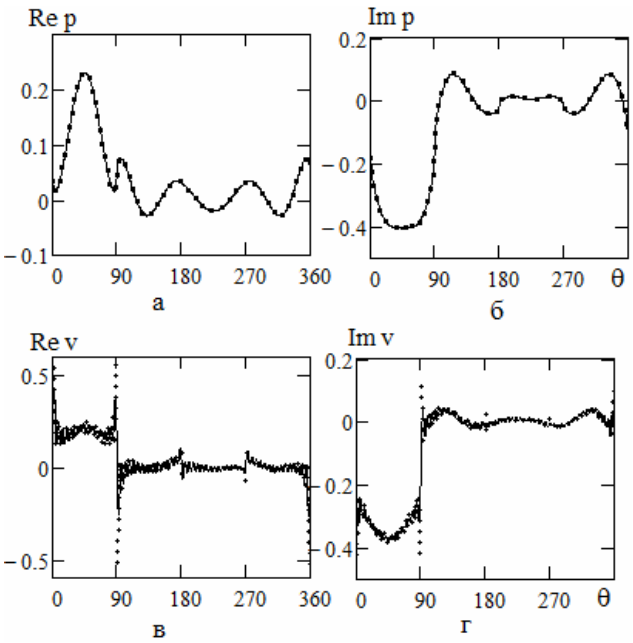


Рис. 2. Поля тиску (а, б) і радіальної швидкості (в, г) на межі часткових областей V і I, II, III, IV : лінії – поле з боку області V, крапки – поле з боку областей I, II, III, IV; $a/\lambda = 0,7$, $R/a = 0,1$

Насамперед, слід перевірити виконання умов спряження полів на межі часткових областей V і I, II, III, IV та збереження потоку потужності крізь коло, що оточує джерела, при зміні радіусу кола. Для всіх розрахунків, котрі представлені нижче, кількість мод (число доданків у сумах (1)-(5)) дорівнювала: для області V – 60, для областей I, II, III, IV – по 30 в кожній. При такій кількості маємо рівність $\alpha_{30} = 60$. Результати розрахунків при $a/\lambda = 0,7$, $R/a = 0,1$ показані на рис. 2. Як бачимо криві, що визначають поле тиску, з графічною точністю збігаються. Для коливальної швидкості, в околі кутових точок хрестика, збіжність кривих менша. Але, як відомо [2], особливість швидкості біля кутових точок має локальний характер і на енергетичні характеристики та дальнє поле впливу не має. Представлені на рис. 2 розрахунки поля на межах часткових областей є типовими і мають місце при інших хвильових розмірах хрестика.

Для перевірки енергетичних співвідношень були обчислені середні потоки потужності через концентричні кола різних радіусів. Результати розрахунків збігаються з точністю до четвертого знаку після коми.

Аналіз чисельних результатів

На рис. 3 представлені частотні характеристики дальнього поля точкового джерела, котре розміщено в області I хрестоподібного джерела (інші джерела не активні). Хвильовий розмір сторони хрестика змінюється в межах від $0,4\lambda$ до λ, тобто частота змінюється більш ніж на октаву. При цьому рис. 3 *а* і *б* відповідають різному положенню джерела відносно центру хрестика (точка перетину сторін хрестика). Криві 1 і 2 визначають, нормовані до максимального значення, амплітуди тиску відносно кутів $\theta = 45^\circ$ та $\theta = 225^\circ$, тобто в напрямку основної пелюстки діаграми направленості та з тильного напрямку.

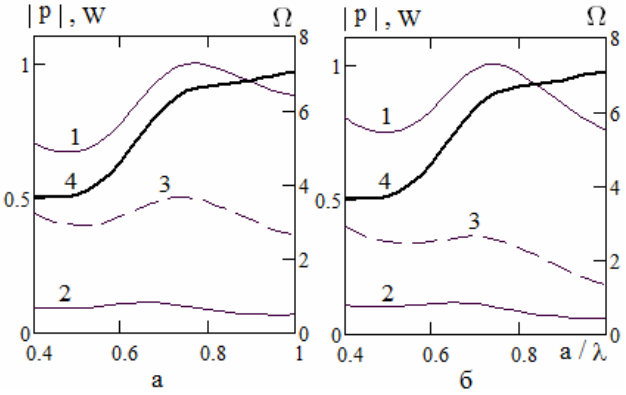


Рис. 3. Характеристики поля в дальній зоні залежно від a/λ : а – $R/a = 0,1$, б – $R/a = 0,2$; криві 1 та 2 – нормовані амплітуди тиску при кутах $\theta = 45^\circ$ та $\theta = 225^\circ$, 3 – потужність випромінювання W , 4 – коефіцієнт концентрації Ω

Перетворювач розміщено поблизу центру хрестика, а саме рис. 3 *а* – $R/a = 0,1$, рис. 3 *б* – $R/a = 0,2$. Перш за все слід відзначити, що відповідні криві на рис. 3 *а* і *б* досить близькі за своїми значеннями. Цей факт говорить про те, що характеристики антени залишаються стабільними при певній похибці в розміщені перетворювача біля центру хрестика. Чутливість перетворювача в напрямку головної пелюстки діаграми направ-

леності, в зазначеному діапазоні хвильового розміру сторони хрестика, змінюється не більш ніж на 30%. Рівень тиску в тильному напрямку залишається практично сталим і достатньо малим за своєю величиною. Беручи це до уваги, а також той факт, що потужність мало змінюється з частотою (крива 3), можна зробити висновок, що дана антена є широкополосною. Що стосується кривої 4, котра визначає коефіцієнт концентрації, то вона має характер зростаючої кривої, що говорить про загострення головної пелюстки діаграми направленості.

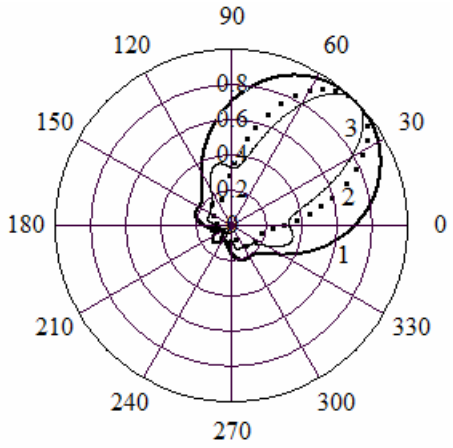


Рис. 4. Діаграми направленості, $R/a = 0,1$:
1 – $a/\lambda = 0,4$, 2 – $a/\lambda = 0,7$, 3 – $a/\lambda = 1$

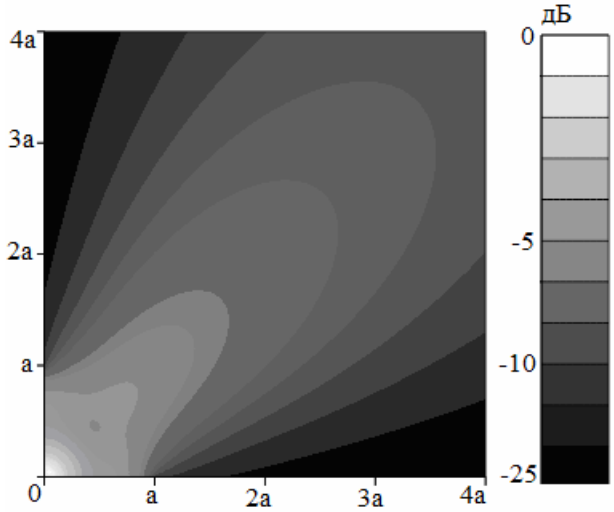


Рис. 5. Поле амплітуди тиску в часткових областях I і V: $R/a = 0,1$, $a/\lambda = 0,7$

Ілюстрацією до сказаного є рис. 4, на котрому зображені характеристики направленості на крайніх та середній частотах зазначеного діапазону частот при величині $R/a = 0,1$. Оскільки, як вже зазначалося, характер кривих на рис. 3 *а* і *б* дуже близький, то і вигляд характеристик направленості, представлених на рис. 4, практично не змінюється при варіаціях положення джерела в межах $R/a = 0,1\ldots0,2$. Цей факт також підтверджує широкополосні властивості антени.

На доданок на рис. 5 показано розподіл амплітуди тиску в ближньому полі джерела в межах області I і, примикаючої до неї, частини області V. На рисунку видно, як формується структура поля тиску в околі джерела.

На закінчення зазначимо, що отримані розрахункові характеристики підтверджують можливість використання хрестоподібного відбивача з чотирьма електроакустичними перетворювачами як антену для практичного застосування в гідроакустичній техніці при вирішенні задач виявлення.

Висновки

1. Побудовано розв'язок задачі про визначення поля точкового гармонічного джерела, розташованого в околі хрестоподібного відбивача.
2. Показано, що ненаправлене за своєю природою точкове джерело, перебуваючи в околі хрестоподібного відбивача набуває властивостей широкополосної антени.
3. Показано, що при розміщенні джерела поблизу центру хрестика ($R/a = 0,1\ldots0,2$) характеристики дальнього поля залишаються стабільними в межах частотного діапазону, котрий перевищує октаву.

Список використаних джерел

1. *Трунова Л.А.* Точкове джерело в околі кутикового відбивача / Л.А. Трунова // Вісник Київського національного університету ім. Тараса Шевченка. Сер:фіз.-мат. науки. – 2014. – №2.
2. *Гринченко В.Т.* Волновые задачи акустики / В.Т. Гринченко, И.В. Вовк, В.Т. Мацыпура. – Киев: Интерсервис, 2013. – 572 с.
3. *Шендеров Е.Л.* Излучение и рассеяние звука / Е.Л. Шендеров. – Л.: Судостроение, 1989. – 304 с.

References

1. TRUNOVA L.A. (2014) Point source in the vicinity of the corner reflector. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kiev, series Physics & Mathematics*. №2.
2. GRINCHENKO, V.T., VOVK, I.V., MATSIPURA, V.T. (2013) *Volnovyie zadachi ackustyki*. Kiev: Interservis.
3. SHENDEROV, E. L. (1989) *Izluchenie i rasseyanie zvyka*. L.: Sudostroenie.

Надійшла до редколегії 26.08.14

УДК 517.9

Задоянчук Н.В.[1], к.ф.-м.н.

N.V. Zadoianchuk[1], PhD

Розв'язність одного класу задач оптимального керування для виродженої параболічної варіаційної нерівності

The solvability of one class of optimal control problem for degenerate parabolic variation inequality

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка,83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: zadoianchuk.nv@gmail.com

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: zadoianchuk.nv@gmail.com

Досліджується задача оптимального керування для виродженої параболічної варіаційної нерівності. За допомогою нерівності Харді-Пуанкаре, отримано достатні умови, за яких наведена оптимізаційна задача має єдиний розв'язок.

Ключові слова: параболічна варіаційна нерівність, вагова функція.

The main object of investigation is the control problem for degenerate parabolic variation inequality. There are many existence results for evolution variation inequalities without degeneration. But the distinction feature of the considered control object is the fact that its solvability sufficiently depends on properties of some weighted degenerate function . Since this function can be unbounded and reach zero on subsets of some set with zero Lebesgue measure, the operator associated with the problem loses properties which play the key role in solvability of considered parabolic variation inequality, and according to classic theorems, guarantee the existence of the solution. The purpose of the paper is to define sufficient conditions for weighted degenerate function under which the mentioned optimal control problem would have a unique solution. In order to do that it is used the transformation that reduces the initial problem to the optimal control problem for parabolic variation inequality with unbounded coefficients of potential type. It is proved that these problems are equivalent in some sense. Thus, using the so called Hardy-Poincare inequality, we proved, that the considered optimal control problem for degenerate parabolic variation inequality has a unique optimal solution in weighted Sobolev space.

Key Words: parabolic variation inequality, weighted function.

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

Постановка задачі.

Нехай $\Omega \subset R^N$ $(N \geq 3)$ - обмежена відкрита підмножина з достатньо регулярною межею $\partial\Omega$ і при цьому $0 \in R^N$ є внутрішньою точкою множини Ω. Нехай $Q = (0,T) \times \Omega$ є циліндром в $R^1 \times R^N$, де $T < +\infty$. Через $\Sigma = (0,T) \times \partial\Omega$ позначимо його бічну поверхню. Нехай функція $\rho : \Omega \to R$ задовольняє умови: $\rho > 0$ м. с. на Ω і при цьому

$$\rho \in L^1(\Omega), \rho^{-1} \in L^1(\Omega), \nabla \ln \rho \in L^2(\Omega, R^N), \quad \rho + \rho^{-1} \notin L^\infty(\Omega). \tag{1}$$

Отже, функцію ρ можна ототожнити з мірою Радона на Ω, поклавши $\rho(E) = \int_E \rho(x)dx$ для довільної вимірної множини $E \subset \Omega$. Нагадаємо, що невід'ємною мірою Радона на Ω називають невід'ємну міру Бореля, яка є скінченною на кожній компактній множині. Надалі з функцією ρ будемо пов'язувати вагові гільбертові простори $L^2(\Omega, \rho dx)$ та $L^2(\Omega, \rho^{-1}dx)$, де зокрема $L^2(\Omega, \rho dx)$ є гільбертовим простором вимірних функцій $f : \Omega \to R$, для яких $\|f\|^2_{L^2(\Omega,\rho dx)} = (f,f)_{L^2(\Omega,\rho dx)} = \int_\Omega f^2 \rho dx < +\infty$.

Також будемо розглядати ваговий простір Соболєва $W_0^{1,2}(\Omega, \rho dx)$, який утворений тими елементами з $W_0^{1,1}(\Omega)$, для яких є скінченою норма $\|y\|_{W_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)} := \left(\int_\Omega y^2 \rho dx + \int_\Omega |\nabla y|^2_{R^N} \rho dx \right)^{1/2}$.

Відомо, що для довільної відкритої обмеженої області $\Omega \subset R^N$ з достатньо регулярною межею $\partial\Omega$ знайдеться така стала величина $C(\Omega) > 0$, що виконується нерівність типу Харді-Пуанкаре (див. [3])

© Н.В. Задоянчук, 2014

$$\int_\Omega \left[|\nabla y|^2_{R^N} - \lambda_* \frac{y^2}{|x|^2_{R^N}} \right] dx \ge C(\Omega) \int_\Omega y^2 dx \qquad (2)$$

$$\forall y \in H_0^1(\Omega), \text{ де } \lambda_* = (N-2)^2/4 .$$

Тоді, як випливає з (2) (див. [5]), $\forall y \in H_0^1(\Omega)$ та $0 < \lambda < \lambda_*$ вирази $\left(\int_\Omega \left[|\nabla y|^2_{R^N} - \lambda \frac{y^2}{|x|^2_{R^N}} \right] dx \right)^{1/2}$ та $\left(\int_\Omega |\nabla y|^2_{R^N} dx \right)^{1/2}$ є еквівалентними нормами в просторі Соболєва $H_0^1(\Omega)$.

Розглянемо непорожню опуклу замкнену підмножину M простору $L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)$, що є також секвенційно замкненою відносно збіжності за нормою:

$$\|y\|^2_{\rho(0,T)} := \int_0^T \int_\Omega y^2 \rho dx dt + \int_0^T \int_\Omega \left| \nabla y + \frac{y}{2} \nabla \ln \rho \right|^2_{R^N} \rho dx dt. \qquad (3)$$

Нехай $y_{ad} \in L^2(Q)$, $f \in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)$ та $u_0 \in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)$ - задані розподілення, U_∂ - непорожня опукла замкнена підмножина в $L^2(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)$ що визначається наступним чином:

$$U_\partial = \left\langle u \in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right) : \left\| u - u_0 \right\|_{L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)} \le L \right\rangle, \qquad (4)$$

де $\|u\|_{L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)} = \int_0^T \int_\Omega \frac{u^2}{\rho} dx dt$. Всюди далі функції $u \in U_\partial$ розглядаються як допустимі керування.

Розглянемо наступну задачу оптимального керування для виродженої нерівності з керуванням у правій частині:

$$I(u,y) = \frac{1}{2} \left\| y - y_{ad} / \sqrt{\rho} \right\|_{L^2\left(0,T;L^2(\Omega,\rho dx)\right)} + \frac{1}{2} \|u\|^2_{L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)} \to \inf, \qquad (5)$$

$$\int_0^T \int_\Omega \dot{v}(v-y) \rho dx dt + \int_0^T \int_\Omega \left(\nabla y, \nabla(v-y) \right)_{R^N} \rho dx dt \ge \ge \int_0^T \int_\Omega f(v-y) dx dt + \int_0^T \int_\Omega u(v-y) dx dt, \qquad (6)$$

$$v \in M, \dot{v} \in L^2\left(0,\mathrm{T};\left(W_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)^*\right), v(0,x) = 0,$$
$$u \in U_\partial,\ y \in M, \qquad (7)$$
$$y(0,x) = 0,\ x \in \Omega. \qquad (8)$$

Таким чином, маємо «слабку» постановку задачі оптимального керування для виродженої нерівності: знайти таку пару функцій

$$\left(u^0, \mathrm{y}^0\right) \in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right) \times \times L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right),$$

для якої виконуються співвідношення (6)-(8) та на якій функціонал (5) досягав би свого найменшого можливого значення.

Попередній аналіз задачі оптимального керування (5)-(8).

Міркуваннями аналогічними до [4, Твердження 1] одержується наступний результат.

Твердження 1. Для довільного елементу $y \in L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)$ має місце представлення $y = \frac{z}{\sqrt{\rho}}$, при цьому $z = \sqrt{\rho} y \in L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,1}(\Omega)\right) \cap L^2\left(0,T;L^2(\Omega)\right)$.

Зауважимо, що аналогічно до [4] будемо мати низку таких проміжних результатів: 1) існує щільна множина $D_\rho \subset L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right)$ така, що $z/\sqrt{\rho} \in L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)$, $\forall z \in D_\rho$;

2) можемо розглядати лінійне відображення $F : D_\rho \subset L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right) \to L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)$ де $Fz = z/\sqrt{\rho}$ та спряжений оператор

$$F^* : D(F^*) \subset L^2\left(0,T;\left(\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)^*\right) \to \to L^2\left(0,T;\left(\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right)^*\right)$$

з відповідними властивостями; 3) $\| y \|_{L^2(0,T;W_\rho)} < \infty$, а тому $M \subset F(D_\rho)$, де W_ρ - замикання простору фінітних функцій $C_0^\infty(\Omega)$ за нормою $\|y\|^2_\rho := \int_\Omega y^2 \rho dx + \int_\Omega \left| \nabla y + \frac{y}{2} \nabla \ln \rho \right|^2_{R^N} \rho dx$.

Розглянемо наступне поняття.

Означення 1: Будемо казати, що $\rho:\Omega\to R_+$ є ваговою функцією потенціального типу, якщо $\rho>0$ м.с. на Ω, $\rho\in L^1(\Omega)$, $\rho^{-1}\in L^1(\Omega)$, $\nabla\ln\rho\in L^2\left(\Omega;R^N\right)$ і існують стала $\hat{C}(\Omega)>0$ і підобласть $\Omega_*\subset\Omega$ така, що $\rho\in C^1\left(\overline{\Omega\setminus\Omega_*}\right)$, де $dist\left(\partial\Omega,\partial\Omega_*\right)>\delta$ при деякому $\delta>0$, і при цьому виконуються такі нерівності:

$$\rho(x)\ge\sigma \text{ на } \Omega\setminus\Omega_* \text{ при деякому } \sigma>0 \quad (9)$$

$$-\hat{C}(\Omega)\le-\Delta\ln\rho(x)-\frac{1}{2}\left|\nabla\ln\rho\right|^2_{R^N}<\frac{2\lambda_*}{|x|^2_{R^N}}. \quad (10)$$

Функція $V(x)=-\Delta\ln\rho(x)-\frac{1}{2}\left|\nabla\ln\rho\right|^2_{R^N}$ називається потенціалом Харді для вагової функції ρ. Перейдемо у варіаційній нерівності (6) до її еквівалентного опису. Для цього утворимо

$$M_1=\left\{\begin{matrix}\eta\in L^2\left(0,\mathrm{T};W_0^{1,2}(\Omega)\right):\eta=\\ =\sqrt{\rho}y,\forall y\in M\subset L^2\left(0,\mathrm{T};W_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)\end{matrix}\right\},$$

яка за побудовою та вихідними припущеннями є опуклою замкненою підмножиною простору $L^2\left(0,\mathrm{T};W_0^{1,2}(\Omega)\right)$. Крім того, елемент $\eta\in M_1$ успадковує властивості сліду вздовж межі області $\partial\Omega$ від елементу $y\in M$.

Розглянемо наступну задачу оптимального керування:

$$J(p,z)=\frac{1}{2}\left\|z-y_{ad}\right\|^2_{L^2(Q)}+\frac{1}{2}\|u\|^2_{L^2(Q)}\to\inf, \quad (11)$$

$$\int_0^T\int_\Omega\dot{w}(w-z)\,dxdt+\int_0^T\int_\Omega\left(\nabla z,\nabla w-\nabla z\right)_{R^N}dxdt-$$

$$-\frac{1}{2}\int_0^T\int_\Omega V(x)z(w-z)dxdt\ge$$

$$\ge\int_0^T\int_\Omega\frac{f}{\sqrt{\rho}}(w-z)\,dxdt+\int_0^T\int_\Omega p(w-z)dxdt, \quad (12)$$

$$\forall w\in M_1,\dot{w}\in L^2\left(0,T;\left(W_0^{1,2}(\Omega)\right)^*\right),w(0,x)=0,$$

$$p\in P_\partial,\ z\in M_1, \quad (13)$$

$$z(0,x)=0,\ x\in\Omega, \quad (14)$$

де $p=\frac{u}{\sqrt{\rho}}$, $V(x)=-\Delta\ln\rho-\frac{1}{2}\left|\nabla\ln\rho\right|^2_{R^N}$,

$$P_\partial:=\left\{p\in L^2(Q):\left\|p-\frac{u_o}{\sqrt{\rho}}\right\|_{L^2(Q)}\le L\right\}.$$

Регулярність задачі оптимального керування (11)-(14)

Покажемо, що у випадку коли $\rho:\Omega\to R$ є ваговою функцією потенціального типу, варіаційна нерівність (12) матиме принаймні один розв'язок при кожному допустимому керувані $p\in P_\partial$. Для цього скористаємося відомими результатами Ж.-Л. Ліонса (див. [1, Теорема 9.2, Теорема 9.4]), який стосується розв'язності параболічних варіаційних нерівностей.

Встановимо наступний результат.

Теорема 1. Нехай $\rho:\Omega\to R_+$ є ваговою функцією потенціального типу. Тоді при заданих $f\in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)$ та $p\in P_\partial$ варіаційна нерівність (12) має єдиний розв'язок $z=z(p,f)\in M_1$.

Доведення. Покладемо

$$V=\left\{w\in W_0^{1,2}(\Omega):\int_\Omega\left(\left|\nabla w\right|^2_{R^N}-\frac{1}{2}v(x)w^2\right)dx<\infty\right\},$$

$H=L^2(\Omega)$ і покажемо, що в цьому випадку для нерівності (12) виконуються всі передумови теореми 9.4 із [1]. Залучаючи міркування з доведення теореми 3.2 із [5], будемо мати, що $V=W_0^{1,2}(\Omega)$. Тому, в силу теореми Реліха-Кондрашова, будемо мати наступні компактні вкладення: $L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)\subset L^2\left(0,T;L^2(\Omega)\right)\subset$

$\subset L^2\left(0,T;\left(W_0^{1,2}(\Omega)\right)^*\right)$. Зауважимо, що множина M_1 задовольняє умови Теореми 9.4 із [1].

Далі, пов'яжемо з нерівністю (12) оператор $B:L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)\to L^2\left(0,T;\left(W_0^{1,2}(\Omega)\right)^*\right)$, визначений за правилом:

$$\left\langle Bz,w\right\rangle_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)}=\int_0^T\int_\Omega\left((\nabla z,\nabla w)_{R^N}-\right.$$

$$\left.-1/2V(x)zw\right)dxdt\,,w\in L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right). \quad (15)$$

Тоді, беручи до уваги співвідношення (9)-(10) та нерівність Харді-Пуанкаре, отримуємо: існують $C_1,C_2>0$:

$$\left|\left\langle Bz,w\right\rangle_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)}\right| \le C_1\left\|z\right\|_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)} \times \times\left\|w\right\|_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)}, \quad (16)$$

$$\left\langle B\left(z-w\right),z-w\right\rangle_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)} \ge \ge C_2\left\|z-w\right\|^2_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)} > 0, \forall z \ne w \quad (17)$$

Отже, оператор B є обмеженим, строго монотонним. Тому оператор $B: L^2\left(0,T;W_0^{1,2}\left(\Omega\right)\right) \to L^2\left(0,T;\left(W_0^{1,2}\left(\Omega\right)\right)^*\right)$ є псевдомонотонним. Крім того, B є коерцитивним в сенсі $\dfrac{\left\langle Bz,z\right\rangle_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)}}{\left\|z\right\|_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)}} \to +\infty,$ $\left\|z\right\|_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)} \to +\infty.$

Для довільного елемента $w_0 \in M_1 \cap D\left(\Lambda, V_1^*\right)$, $V_1^* = L^2(0,T;(W_0^{1,2}(\Omega))^*)$ згідно оцінок (24) та (25), будемо мати:

$$\left\langle Bz, z-w_0\right\rangle_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)} \ge \ge C_2\left\|z\right\|^2_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)} - -C_1\left\|z\right\|_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)} \cdot \left\|w_0\right\|_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)}.$$

Отже, при $\left\|z\right\|_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)} \to +\infty.$

$$\frac{\left\langle Bz, z-w_0\right\rangle_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)}}{\left\|z\right\|_{L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)}} \to +\infty.$$

Тому маємо потрібну коерцитивність в сенсі (9.9) із [1]. Зауважимо, що у випадку, коли $\Lambda = d/dt$ в умовах нашої задачі виконуються умови (9.6) та (9.18) із [1, Приклад 9.2 та Теорема 9.1] . Насамкінець оскільки $f/\sqrt{\rho} \in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega\right)\right)$ та $u/\sqrt{\rho} \in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega\right)\right)$, а простір $L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega\right)\right)$ компактно вкладається в простір $L^2\left(0,T;\left(W_0^{1,2}\left(\Omega\right)\right)^*\right)$, то виконуються всі передумови Теореми 9.4 із [1]. Отже, варіаційна нерівність (12) має єдиний розв'язок $z \in M_1$ при кожному фіксованому допустимому керуванні $p \in P_\partial$. Теорема доведена.

Еквівалентність задач (5)-(8) та (11)-(14).

Далі введемо до розгляду наступні множини:

$$\Xi_1 = \left\{\begin{matrix}\left(u,y\right) \in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)\times \\ \times L^2\left(0,T;W_0^{1,2}\left(\Omega,\rho dx\right)\right)\end{matrix}\right\},$$

де u та y пов'язані співвідношеннями (6)-(8),

$$\Xi_2 = \left\{\left(p,\mathrm{z}\right) \in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega\right)\right)\times L^2\left(0,T;W_0^{1,2}\left(\Omega\right)\right)\right\},$$

де p та z пов'язані співвідношеннями (12)-(14), які надалі будемо називати множинами допустимих розв'язків задач оптимального керування (5)-(8) та (11)-(14) відповідно.

Означення 2. Будемо казати, що пари функцій $\left(u^0,y^0\right) \in \Xi_1$ та $\left(p^0,z^0\right) \in \Xi_2$ є оптимальними розв'язками задач (7)-(10) та (13)-(16) відповідно, якщо:

$$\inf_{(u,y)\in\Xi_1} I\left(u,y\right) = I\left(u^0,y^0\right),$$

$$\inf_{(p,z)\in\Xi_2} J\left(p,z\right) = J\left(p^0,z^0\right).$$

Далі обгрунтуємо результат, що стосується еквівалентності (в певному сенсі) задач оптимального керування (5)-(8) та (11)-(14). Тому, маючи регулярність задачі (11)-(14) (див. Теорму 1), будемо мати регулярність вихідної задачі оптимального керування (5)-(8).

Теорема 2. Нехай $\rho: \Omega \to R_+$ є ваговою функцією потенціального типу. Нехай $f \in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)$, $y_{ad} \in L^2\left(Q\right)$ є заданими функціями. Тоді допустима пара $\left(p^0,z^0\right) \in \Xi_2$ є оптимальною в задачі (11)-(14) в тому і тільки в тому випадку, коли

$$\left(u^0,y^0\right) := \left(\sqrt{\rho}p^0, \frac{z^0}{\sqrt{\rho}}\right) \quad (18)$$

є розв'язком вихідної задачі оптимального керування (7)-(10) на множині Ξ_1. При цьому має місце рівність:

$$\inf_{(p,z)\in\Xi_2} J\left(p,z\right) = J\left(p^0,z^0\right) = = I\left(u^0,y^0\right) = \inf_{(u,y)\in\Xi_1} I\left(u,y\right). \quad (19)$$

Доведення. Пов'яжемо із варіаційною нерівністю (8) оператор $A: L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}\left(\Omega,\rho dx\right)\right) \to L^2\left(0,T;\left(\mathrm{W}_0^{1,2}\left(\Omega,\rho dx\right)\right)^*\right),$ що визначається наступним чином:

$$\left\langle Ay, v-y\right\rangle_{L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)} =$$

$$= \int_0^T \int_\Omega \left(\nabla y, \nabla v - \nabla y\right)_{R^N} \rho dx dt \ \forall v \in M.$$

Тут

$\left\langle \cdot,\cdot \right\rangle_{L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)} : L^2\left(0,T;\left(\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)^*\right) \times$ є

$\times L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right) \to R$

операцією дуального спарювання елементів $L^2\left(0,T;\left(\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)^*\right)$ та $L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)$ відповідно.

Покажемо, що в умовах даної теореми виконується наступне співвідношення: $\left\langle A(Fz), Fv \right\rangle_{L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)} = \left\langle Bz, v \right\rangle_{L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right)}$, де відображення F визначене вище, оператор

$$B : L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right) \to L^2\left(0,T;\left(\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right)^*\right)$$

визначається за правилом

$$\left\langle Bz, v \right\rangle_{L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right)} =$$

$$= \int_0^T \int_\Omega \left(\left(\nabla z, \nabla v\right)_{R^N} - \frac{1}{2} V(x) z w \right) dx dt,$$

$$V(x) = -\Delta \ln \rho(x) - \frac{1}{2} \left|\nabla \ln \rho\right|^2_{R^N},$$

і крім того, лінійний оператор B визначає ізоморфізм простору $L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right)$ в його дуальний простір $L^2\left(0,T;\left(\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right)^*\right)$. Отже, із [4] маємо, зокрема, що для z із деякої щільної підмножини в просторі $W_0^{1,2}(\Omega)$ елемент $z/\sqrt{\rho} \in W_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)$ та $\nabla y = \nabla\left(z/\sqrt{\rho}\right) = 1/\sqrt{\rho}\left(\nabla z - (z/2)\nabla \ln \rho\right)$. Беручи до уваги ці перетворення, той факт, що v для та z із $D_\rho \subset L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)$ маємо, що $Fz, Fv \in L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)$ та, враховуючи співвідношення для $V(x)$, та відповідні співвідношення із [4], будемо мати:

$$\left\langle A(Fz), Fv \right\rangle_{L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega,\rho dx)\right)} =$$

$$= \int_0^T \int_\Omega \left(\nabla\left(\frac{z}{\sqrt{\rho}}\right), \nabla\left(\frac{v}{\sqrt{\rho}}\right) \right)_{R^N} \rho dx dt =$$

$$= \int_0^T \int_\Omega \left(\nabla z - \frac{z}{2}\nabla \ln \rho, \nabla v - \frac{v}{2}\nabla \ln \rho \right)_{R^N} dx dt =$$

$$= \int_0^T \int_\Omega \left(\nabla z, \nabla v\right)_{R^N} dx dt - \frac{1}{2}\int_0^T \int_\Omega V(x) z v dx dt =$$

$$= \left\langle Bz, v \right\rangle_{L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right)}.$$

Тепер оскільки вагова функція ρ є функцією потенціального типу, то з нерівності Харді-Пуанкаре випливає еквівалентність норм $\left(\int_\Omega \left[\left|\nabla y\right|^2_{R^N} - \lambda \frac{y^2}{\left|x\right|^2_{R^N}} \right] dx\right)^{\frac{1}{2}}$ та $\left(\int_\Omega \left|\nabla y\right|^2_{R^N} dx\right)^{\frac{1}{2}}$ в просторі $W_0^{1,2}(\Omega)$, а відтак будемо мати еквівалентність відповідних норм в просторі $L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)$, а це і означає, що оператор B визначає ізоморфізм між $L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)$ та $L^2\left(0,T;\left(W_0^{1,2}(\Omega)\right)^*\right)$. Далі, із твердження 1 маємо, що $\forall v \in M$ існує елемент $w \in M_1 : v = Fw := \frac{w}{\sqrt{\rho}}$.

Одержуємо: $\int_0^T \int_\Omega \dot{v}(v-y)\rho dx dt = \int_0^T \int_\Omega \dot{w}(w-t)\rho dx dt,$

$$\int_0^T \int_\Omega f(v-y) dx dt = \int_0^T \int_\Omega \frac{f}{\sqrt{\rho}}(w-z) dx dt,$$

$$\int_0^T \int_\Omega u(v-y) dx dt = \int_0^T \int_\Omega p(w-z) dx dt.$$

Таким чином, приходимо до наступного висновку: $y \in M$ є розв'язком варіаційної нерівності (6) тоді й лише тоді, коли $z = \sqrt{\rho} y \in M_1$ є розв'язком варіаційної нерівності (12). Отже, розв'язки варіаційної нерівності (6) та (12) пов'язані співвідношенням $y = z/\sqrt{\rho}$.Тепер означимо в просторі $L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)$ відображення G за правилом $G(u) = \left(u/\sqrt{\rho}\right)$. Будемо мати, що для довільного керування $u \in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)$ виконується $p = G(u)$, де $\left\|u\right\|^2_{L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)} = \left\|p\right\|^2_{L^2\left(0,T;L^2(\Omega)\right)}$. Тому відображення G ізометрично відображає простір $L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)$ на простір $L^2\left(0,T;L^2(\Omega)\right)$.

Більш того, умова (13) гарантує еквівалентність тверджень:

$$u \in U_\partial \Leftrightarrow p = u/\sqrt{\rho} \in P_\partial$$

Таким чином, $(u,y)\in\Xi_1 \Leftrightarrow (p,z)\in\Xi_2$. А відтак має місце рівність (5) та (11) на відповідних допустимих парах, що гарантує виконання умови (19).

Розв'язність оптимізаційної задачі.

Теорема 3. Нехай $\rho:\Omega\to R_+$ є ваговою функцією потенціального типу. Нехай $f\in L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)$, $y_{ad}\in L^2(Q)$ є заданими функціями. Тоді задача оптимального керування (5)-(8) має єдиний розв'язок $\left(u^0,y^0\right)$ в просторі $L^2\left(0,T;L^2\left(\Omega,\rho^{-1}dx\right)\right)\times L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}\left(\Omega,\rho dx\right)\right)$.

Доведення. За Теоремою 2 задачі (5)-(8) та (11)-(14) є еквівалентними. Тому для однозначної розв'язності задачі (5)-(8) достатньо показати, що задача (11)-(14) має єдиний розв'язок. Зауважимо, що має місце неперервна залежність розв'язку z від керування p в деякому сенсі, а саме, в силу коерцитивності оператора B, напівнеперервності знизу норми в просторі $L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right)$ відносно слабкої збіжності, компактності вкладення $L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right)\subset L^2\left(0,T;L^2(\Omega)\right)$, відображення $p\mapsto z(p)$ простору $L^2\left(0,T;L^2(\Omega)\right)$ в $L^2\left(0,T;\mathrm{W}_0^{1,2}(\Omega)\right)$ є слабко неперервним (дет. див [4]). Відмітимо, що функціонал якості строго опуклий, обмежений знизу, коерцитивний та напівнеперервний знизу на $L^2\left(0,T;L^2(\Omega)\right)\times L^2\left(0,T;\left(W_0^{1,2}(\Omega)\right)\right)$. Отже, за теоремами 1.1 та 1.2 із [2] існує єдина пара $\left(p^0,z^0\right)\in L^2\left(0,T;L^2(\Omega)\right)\times L^2\left(0,T;W_0^{1,2}(\Omega)\right)$ така, що $\left(p^0,z^0\right)\in\Xi_2$ і $J\left(p^0,z^0\right)=\inf\limits_{(p,z)\in\Xi_2}J(p,z)$, тобто $\left(p^0,z^0\right)$ є оптимальною парою задачі (11)-(14). Таким чином, за теоремою 2, пара $\left(u^0,\mathrm{y}^0\right):=\left(\sqrt{\rho}p,z/\sqrt{\rho}\right)$ є єдиним оптимальним розв'язком задачі (5)-(8), що і потрібно було встановити.

Список використаних джерел

1. *Lions J.-L.* Some Methods of Solving Non-linear Boundary Value Problems / J.-L. Lions. - Paris:Dunod-Gauthier-Villars, 1969. – 588 p.
2. *Lions J.-L.* Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equations / J.-L. Lions. – Berlin: Springer-Verlag, 1971. – 415 p.
3. *Vazquez J.L., Zuazua E.* The Hardy inequality and the asymptotic behaviour of the heat equation with an inverse-square potential / J.L.Vazquez ,E. Zuazua // J. of Functional Analysis. – 2000. Vol. 173, - P. 103--153.
4. *Задоянчук Н.В., Купенко О.П.* Про розв'язність одного класу задач оптимального керування для вироджених еліптичних варіаційних нерівностей / Н.В. Задоянчук, О.П. Купенко // Журнал обчислювальної та прикладної математики. – 2013. - №4. – С. 10-23.
5. *Баланенко І.Г., Когут П.І.* Про одну задачу оптимального керування для виродженого параболічного рівняння / І.Г. Баланенко, П.І. Когут // Вісник ДНУ. Серія Моделювання. – 2012. - №8. – С. 3-18.

References

1. LIONS,J.-L.(1969) *Some Methods of Solving Non-linear Boundary Value Problems.* Paris:Dunod-Gauthier-Villars.
2. LIONS,J.-L.(1971) *Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equation.* Berlin: Springer-Verlag.
3. VAZQUEZ,J.L & ZUAZUA,E (2000) The Hardy inequality and the asymptotic behaviour of the heat equation with an inverse-square potential. *J. of Functional Analysis.* 173. pp.103-153.
4. ZADOIANCHUK, N.V. & KUPENKO, O.P. (2013) Pro rozviaznist odnogo klasu zadach optymalnogo keruvannia dlia vyrodzhenih eliptychnih variatsiinyh nerivnostei. *J. of Computational & Applied Mathematics.* 4. pp. 10-23.
5. BALANENKO, I.G & KOGUT I.P. (2012) Pro odnu zadachu optimalnogo keruvannia dlia virodzhennogo parabolichnogo rivnyannia. *Visnik DNU. Seriya Modelyuvannya.* 8. pp. 3-18.

Надійшла до редколегії 28.08. 2014

УДК 539.375

Назаренко В.М.[1], *д.т.н., професор*
Кіпніс О.Л.[1], *аспірант*

Концентрація напружень біля кутової точки межі поділу середовищ у кусково-однорідній площині за наявності тріщини

[1]Інститут механіки ім. С.П. Тимошенка НАН України, 03057, м. Київ, вул. Нестерова, 3
E-mail: a.l.kipnis@gmail.com

V.M. Nazarenko[1], doctor of engineering, professor
A.L. Kipnis[1], graduat student

Stress concentration near the corner point of interface in piece-homogeneous plane with a crack

[1]S.P. Timoshenko Institute of Mechanics, 03057, Kyiv, Nesterova str, 3
E-mail: a.l.kipnis@gmail.com

Методом Вінера – Гопфа побудовано точний розв'язок симетричної задачі про пружну рівновагу кусково-однорідної ізотропної площини з межею поділу середовищ у формі сторін кута, яка містить внутрішню напівнескінченну навантажену тріщину. Досліджено поведінку напружень біля кутової точки.

Ключові слова: кутова точка, межа поділу середовищ, внутрішня напівнескінченна тріщин, метод Вінера – Гопфа.

An exact solution of symmetric problem on the elastic equilibrium of piece-homogeneous isotropic plane with the interface of media in the form the sides of angle, which contains an interior semi-infinite loaded crack is constructed. By the using of Mellin's integral transformation apparatus, the problem is reduced to the Wiener – Hopf functional equation in the complex plane strip which contains the imagine axis. The factorization of the functional equation coefficient is realized by the decomposing of the coefficient in two functions: the function which is factorized in gamma-functions and the function which is factorized by the using of Cauchy type integral properties. According to these factorizations, the exact solution of the Wiener – Hopf equation which expressed in Cauchy type integrals and gamma-functions is obtained. Based on the functional equation solution, stresses in the problem and the main terms of the stresses expansion in asymptotic series near the corner point are determined. The stress behavior near the corner point is investigated.

Key words: corner point, interface, interior semi-infinite crack, Wiener – Hopf method.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Жук Я.О.

Вступ. В літературі з механіки руйнування композитних матеріалів опублікована велика кількість праць, які присвячено плоским статичним задачам теорії пружності для кусково-однорідних тіл з тріщинами. При цьому о більшості з них вважається, що межа поділу середовищ є гладкою, у першу чергу, прямолінійною [1]. Але кутові точки негладкої межі поділу середовищ являють собою концентратори напружень. У відповідних задачах теорії пружності при наближені точки області до кутової точки межі поділу середовищ напруження прямують до нескінченності. Тому кожний з таких концентраторів напружень є надзвичайно небезпечним з точки зору можливості розриву суцільності біля нього і зародження тріщин, що виходять з нього, довжини яких значно менші за розміри тіла.

Викладене вище обґрунтовує актуальність проблеми дослідження задач механіки руйнування композитних матеріалів про тріщини у кусково-однорідних тілах з негладкою межею поділу середовищ.

В даній роботі розв'язано задачу такого класу та досліджено поведінку напружень біля кутової точки межі поділу середовищ.

Постановка задачі. Розглянемо кусково-однорідну ізотропну пружну площину з межею поділу середовищ у формі сторін кута, яка в одній з частин містить симетричну внутрішню напівнескінченну тріщину (Рис. 1). Береги тріщини знаходяться під дією нормального тиску, розподіленого за законом F / r^2, $r \geq l$ (F – задана додатна стала, що має розмірність сили).

© В. М. Назаренко, О.Л. Кіпніс, 2014

Крайові умови відповідної статичної симетричної задачі теорії пружності мають вигляд

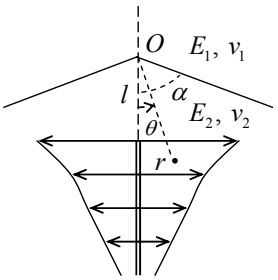


Рис. 1

$$\theta=\alpha,\ \langle\sigma_\theta\rangle=\langle\tau_{r\theta}\rangle=0,\ \langle u_\theta\rangle=\langle u_r\rangle=0; \qquad (1)$$

$$\theta=0,\ \tau_{r\theta}=0;\ \theta=\pi,\ \tau_{r\theta}=0,\ u_\theta=0;$$

$$\theta=0,\ r<l,\ u_\theta=0;\ \theta=0,\ r>l,\ \sigma_\theta=-F/r^2. \qquad (2)$$

($0\le\theta\le\pi$; $\langle a\rangle$ – стрибок a).

Метою роботи є аналіз поведінки напружень біля кутової точки.

Рівняння Вінера – Гопфа та його розв'язок. Серед методів розв'язання задач механіки руйнування, які застосовуються у даний час [1 – 4], одним з ефективних є метод Вінера – Гопфа. Для побудови точного розв'язку задачі, що розглядається, будемо використовувати метод Вінера – Гопфа у поєднанні з апаратом інтегрального перетворення Мелліна [5, 6].

Застосовуючи перетворення Мелліна

$$m^*(p)=\int_0^\infty m(r)r^p\,dr$$

до рівнянь рівноваги, умови сумісності деформацій, закону Гука і умов (1), приходимо до співвідношення, що зв'язує трансформанти

$\sigma_\theta^*(p,0)$ і $\left(\dfrac{\partial u_\theta}{\partial r}\right)^*_{\theta=0}$

$$\sigma_\theta^*(p,0)=\frac{\tilde\Delta(p)}{2\Delta_0(p)}\frac{E_2}{2(1-\nu_2^{\,2})}\left(\frac{\partial u_\theta}{\partial r}\right)^*_{\theta=0}, \qquad (3)$$

$$\Delta_0(p)=(\sin 2p\alpha+p\sin 2\alpha)\left[æ_1\sin 2p(\pi-\alpha)+p\sin 2\alpha\right]+\left\{(1+æ_1)(1+æ_2)\sin^2 p\pi-(\sin 2p\alpha+p\sin 2\alpha)\times\right.$$
$$\left.\times\left[æ_1\sin 2p(\pi-\alpha)+p\sin 2\alpha\right]-\left[\sin 2p(\pi-\alpha)-p\sin 2\alpha\right](æ_2\sin 2p\alpha-p\sin 2\alpha)\right\}e+$$
$$+\left[\sin 2p(\pi-\alpha)-p\sin 2\alpha\right](æ_2\sin 2p\alpha-p\sin 2\alpha)e^2,$$

$$\tilde\Delta(p)=-4(\sin^2 p\alpha-p^2\sin^2\alpha)\left[æ_1\sin 2p(\pi-\alpha)+p\sin 2\alpha\right]+\left\{(1+æ_1)(1+æ_2)\sin 2p\pi+4(\sin^2 p\alpha-p^2\sin^2\alpha)\times\right.$$
$$\left.\times\left[æ_1\sin 2p(\pi-\alpha)+p\sin 2\alpha\right]-\left[\sin 2p(\pi-\alpha)-p\sin 2\alpha\right]\left[(1+æ_1)(1+æ_2)-4(æ_2\sin^2 p\alpha+p^2\sin^2\alpha)\right]\right\}e+$$
$$+\left[\sin 2p(\pi-\alpha)-p\sin 2\alpha\right]\left[(1+æ_2)^2-4(æ_2\sin^2 p\alpha+p^2\sin^2\alpha)\right]e^2,$$

$$e=\frac{1+\nu_2}{1+\nu_1}e_o,\quad e_0=\frac{E_1}{E_2},\quad æ_{1,2}=3-4\nu_{1,2}$$

($-\varepsilon_1<\mathrm{Re}\,p<\varepsilon_2$, $\varepsilon_{1,2}$ – досить малі додатні числа).

Згідно з (2)

$$\sigma_\theta^*(p,0)=l^{p+1}\left[\Phi^-(p)+\frac{\sigma}{p-1}\right], \qquad (4)$$

$$\frac{E_2}{2(1-\nu_2^{\,2})}\left(\frac{\partial u_\theta}{\partial r}\right)^*_{\theta=0}=l^{p+1}\Phi^+(p),$$

$$\Phi^-(p)=\int_0^1\sigma_\theta(\rho l,0)\rho^p\,d\rho,$$

$$\Phi^+(p)=\frac{E_2}{2(1-\nu_2^{\,2})}\int_1^\infty\left.\frac{\partial u_\theta}{\partial r}\right|_{\substack{r=\rho l\\ \theta=0}}\rho^p\,d\rho,$$

$$\sigma=\frac{F}{l^2}.$$

Підставляючи (4) у (3), одержуємо наступне функціональне рівняння Вінера – Гопфа:

$$\Phi^-(p)+\frac{\sigma}{p-1}=\mathrm{ctg}\,p\pi G(p)\Phi^+(p), \qquad (5)$$

$$G(p)=\frac{\tilde\Delta(p)\sin p\pi}{2\Delta_0(p)\cos p\pi}\quad(-\varepsilon_1<\mathrm{Re}\,p<\varepsilon_2).$$

За допомогою факторизацій

$$G(p)=\frac{G^+(p)}{G^-(p)}\ (\mathrm{Re}\,p=0), \qquad (6)$$

$$\exp\left[\frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty}^{i\infty}\frac{\ln G(z)}{z-p}dz\right]=\begin{cases}G^+(p), & \mathrm{Re}\,p<0\\ G^-(p), & \mathrm{Re}\,p>0\end{cases};$$

$$p\,\mathrm{ctg}\,p\pi=K^+(p)K^-(p),\ K^\pm(p)=\frac{\Gamma(1\mp p)}{\Gamma(1/2\mp p)}$$

($\Gamma(z)$ – гамма-функція) рівняння (5) перепишемо так:

$$\frac{G^-(p)\Phi^-(p)}{K^-(p)}+\frac{\sigma G^-(p)}{(p-1)K^-(p)}=\frac{K^+(p)G^+(p)\Phi^+(p)}{p}$$
$$(\mathrm{Re}\, p=0). \qquad (7)$$

Справедливе представлення

$$\frac{\sigma G^-(p)}{(p-1)K^-(p)}=\frac{\sigma}{p-1}\left[\frac{G^-(p)}{K^-(p)}-\frac{G^-(1)}{K^-(1)}\right]+\frac{\sigma G^-(1)}{(p-1)K^-(1)}$$
$$(\mathrm{Re}\, p=0). \qquad (8)$$

Підставляючи (8) у (7), одержуємо

$$\frac{K^+(p)G^+(p)\Phi^+(p)}{p}-\frac{\sigma G^-(1)}{(p-1)K^-(1)}= \qquad (9)$$
$$=\frac{G^-(p)\Phi^-(p)}{K^-(p)}+\frac{\sigma}{p-1}\left[\frac{G^-(p)}{K^-(p)}-\frac{G^-(1)}{K^-(1)}\right] \text{ (Rep=0).}$$

Функція в лівій частині (9) аналітична у півплощині $\mathrm{Re}\, p<0$, а функція в правій частині (9) аналітична у півплощині $\mathrm{Re}\, p>0$. На основі принципу аналітичного продовження ці функції дорівнюють одній і тій самій функції, що аналітична у всій площині p.

Виходячи з відомої асимптотики розв'язку біля кінця тріщини, за теоремою абелева типу одержуємо

$$\Phi^+(p)\ \square\ \frac{K_I}{\sqrt{-2pl}},\ \Phi^-(p)\ \square\ \frac{K_I}{\sqrt{2pl}} \quad (p\to\infty) \qquad (10)$$

(K_I – коефіцієнт інтенсивності напружень у кінці тріщини).

З (6), (10) випливає, що функції у лівій і правій частинах (9) прямують до нуля при $p\to\infty$ у півплощинах $\mathrm{Re}\, p<0$ і $\mathrm{Re}\, p>0$ відповідно. За теоремою Ліувілля єдина аналітична функція тотожно дорівнює нулю у всій площині p.

Таким чином, розв'язок рівняння (5) має вигляд

$$\Phi^+(p)=\frac{\sigma G^-(1)p}{K^-(1)(p-1)K^+(p)G^+(p)} \quad (\mathrm{Re}\, p<0), \qquad (11)$$
$$\Phi^-(p)=\frac{\sigma K^-(p)}{(p-1)G^-(p)}\left[\frac{G^-(1)}{K^-(1)}-\frac{G^-(p)}{K^-(p)}\right] \quad (\mathrm{Re}\, p>0).$$

Аналіз поведінки напружень біля кутової точки. Використовуючи (3), (4), (11) і формулу обернення Мелліна, знаходимо

$$\sigma_\theta(r,0)=\frac{1}{2\pi i}\int_\gamma M(p)r^{-p-1}dp, \qquad (12)$$

$$M(p)=\frac{\sigma G^-(1)p\tilde{\Delta}(p)l^{p+1}}{2K^-(1)(p-1)\Delta_0(p)K^+(p)G^+(p)}$$

(γ – довільна пряма, яка лежить у смузі $-\varepsilon_1<\mathrm{Re}\, p<0$).

У смузі $-1\le \mathrm{Re}\, p<0$ підінтегральна функція у (12) має єдину особливість – простий полюс в точці $p=-\lambda_0-1$, де λ_0 – єдиний на інтервалі $]-1;0[$ корінь рівняння $\Delta_0(-\lambda-1)=0$. За теоремою про лишки

$$\sigma_\theta(r,0)=\Sigma r^{\lambda_0}+f(r) \quad (r\to 0),$$
$$\Sigma=\frac{\sqrt{\pi}\tilde{\Delta}(-\lambda_0-1)\Gamma(\lambda_0+3/2)G^-(1)}{4(\lambda_0+2)s_0\Gamma(\lambda_0+1)G^+(-\lambda_0-1)}\frac{F}{l^{\lambda_0+2}},$$
$$s_0=\Delta_0'(-\lambda_0-1).$$

У цій формулі $f(r)\to 0$ при $r\to 0$; $\Delta_0'(p)$ – похідна функції $\Delta_0(p)$.

Залежність показника степеня сингулярності напружень λ_0 від кута α якісно зображено на рис. 2. Значення $\alpha^\circ_{\min 1}$, $\alpha^\circ_{\min 2}$ кута α, при яких функція $\lambda_0(\alpha)$ досягає свого найменшого значення на кожному з інтервалів $]0;\pi/2[$, $]\pi/2;\pi[$, а також значення $\lambda(\alpha_{\min 1})$, $\lambda(\alpha_{\min 2})$ наведено у табл. 1 ($\nu_1=\nu_2=0{,}3$). Деякі значення λ_0 наведено у табл.. 2.

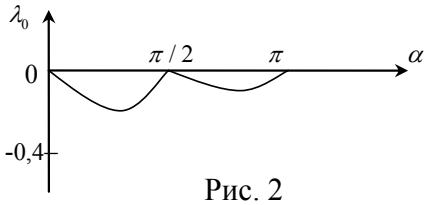


Рис. 2

e_0	2	3	5	10
$\alpha^\circ_{\min 1}$	57,3°	54,1°	46,7°	42,2°
$\lambda(\alpha_{\min 1})$	-0,1232	-0,1893	-0,2622	-0,3321
$\alpha^\circ_{\min 2}$	152,6°	155,8°	163,4°	168,3°
$\lambda(\alpha_{\min 2})$	-0,1204	-0,1801	-0,2474	-0,3181

Табл.1

Аналіз одержаних результатів дозволяє зробити наступні висновки. Кутова точка O є особливою точкою крайової задачі теорії пружності, що розглядається. Вона являє собою гострокінцевий концентратор напружень. При наближенні точки області до точки O напруження прямують до нескінченності.

Особливість напружень у точці O степенева. Показник степеня сингулярності напружень залежить від кута, відношення модулів Юнга та від коефіцієнтів Пуассона. Цей показник являє собою єдиний на інтервалі $]-1;0[$ корінь певного трансцендентного рівняння.

Зі зростанням кута α від нуля до $\pi/2$ і від $\pi/2$ до π концентрація напружень біля кутової

точки спочатку посилюється, а потім послаблюється. Значенням відношення модулів Юнга, що дорівнюють 2; 3; 5; 10, відповідають значення кута найбільшої концентрації напружень, що дорівнюють $57,3^\circ;\ 54,1^\circ;\ 46,7^\circ;\ 42,2^\circ$.

e_0 \ α°	15	30	45	60	75	105	120	135	150	165
2	-0,036	-0,075	-0,112	-0,112	-0,086	-0,025	-0,054	-0,089	-0,117	-0,104
3	-0,068	-0,132	-0,180	-0,184	-0,127	-0,037	-0,081	-0,130	-0,173	-0,168
5	-0,122	-0,232	-0,258	-0,248	-0,167	-0,049	-0,104	-0,168	-0,228	-0,241
10	-0,215	-0,310	-0,332	-0,308	-0,203	-0,059	-0,124	-0,202	-0,278	-0,318

Табл.2

Чим більше відрізняються матеріали (зі зростанням відношення модулів Юнга), тим сильніша концентрація напружень біля кутової точки.

Зі зростанням відношення модулів Юнга гострий кут максимальної концентрації напружень зменшується, а тупий – збільшується.

.

Висновки. На основі одержаного в даній роботі точного розв'язку симетричної задачі про пружну рівновагу кусково-однорідної ізотропної площини з межею поділу середовищ у формі сторін кута, яка містить внутрішню напівнескінченну навантажену тріщину, вивчено вплив зміни кута і пружних сталих на рівень концентрації напружень біля кутової точки.

Список використаних джерел

1. *Механика* разрушения и прочность материалов: Справ. пособие: В 4 т. Т.1,2. – К.: Наук. думка, 1988.
2. *Guz A.N.* Stability of elastic bodies under uniform compression (Review)/ A.N. Guz // Int. Appl. Mech. – 2012. – 48, №3. – P. 241 – 243.
3. *Guz A.N.* Three-Dimensional Problems in the Dynamic Fracture Mechanics of Materials with Interface Cracks (Review) / A.N. Guz, I.A. Guz, A.V. Men'shikov, V.A. Men'shikov /Int. Appl. Mech. – 2013. – 49, №1. – P. 1 – 61.
4. *Guz A.N.* Establishing the Foundations of the Mechanics of Fracture of Materials Compressed Along Cracks (Review) / A.N. Guz // Int. Appl. Mech. – 2014. – 50, №1. – P. 1 – 57.
5. *Нобл Б.* Применение метода Винера – Хопфа для решения дифференциальных уравнений в частных производных / Б. Нобл. – М.: Изд-во иностр. лит., 1962. – 279 с.
6. *Уфлянд Я.С.* Интегральные преобразования в задачах теории упругости / Я.С. Уфлянд. – Л.: Наука, 1967. – 402 с.

References

1. *Mekhanika razrusheniya i prochnost materialov: Spravochnoe posobie v 4 tomah. Tom 1,2 (1988).* Kiev: Nauka.
2. GUZ, A.N. (2012) Stability of elastic bodies under uniform compression (Review). *Int. Appl. Mech.* 48(3). p. 241-243.
3. GUZ, A.N., GUZ, I.A., MEN'SHIKOV, A.V. and MEN'SHIKOV, V.A. (2013) Three-Dimensional Problems in the Dynamic Fracture Mechanics of Materials with Interface Cracks (Review). *Int. Appl. Mech.* 49(1). p. 1- 61.
4. GUZ, A.N. (2014) Establishing the Foundations of the Mechanics of Fracture of Materials Compressed Along Cracks (Review). *Int. Appl. Mech.* 50(1). p. 1-57.
5. NOBL, B. (1962*) Primenenie metoda Winera – Hopfa dlya resheniia differentsialnikh uravneniy v chastnikh proizvodnikh.* Moskva: Izdatelstvo inostrannoyi literaturi.
6. UFLYAND, YA. (1967) *Integralnyie preobrazovaniya v zadachakh teorii uprugosti.* Leningrad: Nauka.

Надійшла до редколегії 18.06.2014

УДК 532.595

Кудзіновська[1] І.П., к.т.н., доцент
Лимарченко[2] О.С., д.т.н., проф.
Мельник[2] В.М., аспірант

Параметричні коливання рідини з вільною поверхнею в резервуарі конічної форми

[1]Національний авіаційний університет, 03058, м. Київ, проспект Комарова 1,
e-mail: Kudzinovskaya@ukr.net
[2]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр.-т Глушкова 4е,
e-mail: olelim2010@yahoo.com

Kudzinovs'ka I.P., candidate of technical sci.
Limarchenko O.S., doctor of eng., prof.
Melnik V.N., graduate student

Parametric oscillations of liquid with a free surface in reservoir of conic shape

[1]NationalAviationUniversity, 03058, Kiev. Komarova ave., 1,
e-mail: Kudzinovskaya@ukr.net
[2]Taras Shevchenko KievNationalUniversity, 03680, Kyiv, Glushkova ave., 4e,
e-mail: olelim2010@yahoo.com

Досліджується задача про параметричні коливання рідини з вільною поверхнею в резервуарі конічної форми (задача Фарадея). Показано як різні параметри збудження коливань системи і початкові умові впливають на розвинення динамічних процесів.

Ключові слова: рідина з вільною поверхнею, конічний резервуар, параметричні коливання.

The problem about parametric oscillations of liquid with a free surface in reservoir of conic shape (the Faraday problem) is under investigation. Liquid is considered as ideal, incompressible, reservoir is a rigid body of conic shape. Investigation is done on the basis of nonlinear model of combined motion of liquid with reservoir with representation of liquid motion as decomposition with respect to normal modes of oscillations. Resolving mathematical model is obtained in the form of a system of ordinary differential equations relative to parameters of motion of reservoir and amplitudes of excitation of normal modes of oscillation of liquid with a free surface. It is shown how different parameters of disturbance of oscillations and initial conditions influence development of dynamic processes. We focused our attention on absolute value of ultimate wave and time of this maximum manifestation depending on initial excitation of liquid. Effects of modulation of oscillations and drift of mean level of oscillating parameters were discovered.

KeyWords: liquid with a free surface, conic reservoir, parametric oscillations.

Статтю представив доктор фізико-математичних наук, професор Я.О. Жук

Вступ

Класична задача Фарадея про параметричні коливання рідини з вільною поверхнею в останні роки знову привернула увагу дослідників [1, 2, 4].Відомо, що в класичній постановці ця задача призводить до таких результатів: за наявності малих початкових збурень по антисиметричних формах коливань вільної поверхні рідини при вимушених вертикальних коливаннях кругового циліндричного резервуара існують два діапазони частот коливань резервуара, коли антисиметричні збурення зростають. Перший діапазон спостерігається в околі основної частоти коливань рідини по першій антисиметричній формі і є дуже вузьким (потрапити в цей діапазон достатньо складно); другий діапазон лежить в околі подвоєної частоти коливань рідини по першій антисиметричній формі і є достатньо широким. Дослідження останніх років показали, що класична задача Фарадея є достатньо ідеалізованою і для більшої відповідності практиці має враховувати ряд додаткових факторів. Частина з них обумовлена технічною задачею про повздовжні коливання ракет. Наприклад, поздовжніх коливаннях ракет рух ракети в поперечному напрямку і відповідний кутових рух в поперечній площині не обмежуються і при розвиненні антисиметричних коливань рідини встановиться режим сумісних коливань резервуару з рідиною. При цьому частоти сумісних коливань резервуара з рідиною будуть суттєво відрізнятися від парціальних частот [1]. В класичній задачі Фарадея рух резервуара збуджувався за заданим законом, що відповідає нескінченій масі резервуара. В прикладних задачах навпаки маса резервуара поступається масі рідини, тому важливо дослідити випадок силового збудження коливань в системі.

©І.П. Кудзіновська, О.С. Лимарченко, В.М. Мельник, 2014

Лише в останні роки було розглянуто питання про вплив в'язкості і поверхневого натягу на вільній поверхні на розвинення параметричного резонансу [1]. До теперішнього часу задача Фарадея розглядалася виключно для резервуарів циліндричної форми.

Метою дослідження даної статті є постановка задачі Фарадея про параметричні коливання рідини в резервуарі конічної форми і дослідження впливу параметрів збудження коливань системи і початкових збурень на подальше розвинення параметричного резонансу.

Математична модель системи

Математична модель, отримана на основі[3], представлена в амплітудних параметрах a_i коливань рідини та поступального руху резерву-ара $\vec{\varepsilon}$:

$$\sum_{n=1}^{N} p_{rn}(a_k,t)\ddot{a}_n + \sum_{n=N+1}^{N+3} p_{rn}(a_k,t)\ddot{\varepsilon}_{n-N} = q_r(a_k,\dot{a}_l,t),$$
$$r=\overline{1,N+3} \quad (1)$$

При цьому коефіцієнти p_{rn} визначаються через алгебраїчні форми від першого до третього порядку з коефіцієнтами, які визначаються через квадратури від форм коливань (координатних функцій). Для побудови координатних функцій використовувався метод допоміжної області, який на відміну від класичного методу враховує виконання умови неперетікання вище рівня незбуреної вільної поверхні. Результативизначеннявідносної похибки виконання умови неперетікання(відношення порушення умови неперетікання до максимального збурення на вільній поверхні рідини) для оберненого усіченого конусапоказують, що на твердих границях похибка не перевершує 10^{-6}, а на продовженні бічної поверхні до висоти 0,2радіуса вільної поверхні вона не перевершує 10^{-3}, що є цілком придатним для проведення прикладних досліджень. Зазначимо, що необхідність високоточного задовільнення цих умов пов'язана з виконанням умов розв'язності крайової задачі Неймана для рівняння Лапласа, якою описується задача для визначення форм коливань вільної поверхні рідини.

В подальших розрахунках прийнято, що резервуар виконує коливальні рухи лише в вертикальному напрямку, вільна поверхня рідини в початковому стані має збурення за першою формою коливань, система здійснює коливання внаслідок прикладання гармонічної сили в повздовжньому напрямку $F_z = A\cos\Omega t$. Досліджувався рух системи при випадку, коли частота зовнішнього збудження приблизно в два рази була більшою за власну частоту першої антисиметричної форми коливань.

Аналіз чисельних результатів

Розглянемо спочатку вільні коливання системи за умови початкового збурення коливань внаслідок відхилення вільної поверхні рідини з амплітудою $0,1R$, де R – радіус незбуреної вільної поверхні рідини. На Рис. 1 показано залежність амплітуди першої антисиметричної форми від часу в секундах. .

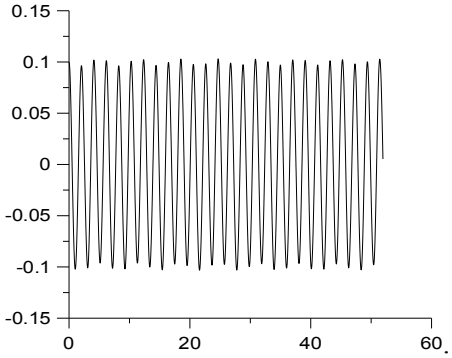


Рис. 1. Вільні коливання за першою формою

З рисунку видно, що коливання відбуваються з практично незмінною амплітудою. Малі зміни амплітуд обумовлені фактором сумісності руху рідини і резервуара. Розглянемо тепер рух системи при початковому збуренні 0,1 під дією гармонічної сили з амплітудою 0,7 з частотою, що приблизно в два рази більша за частоту власних коливань системи за основною формою. В цьому випадку коливання вільної поверхні набудуть модуляцію (Рис. 2).

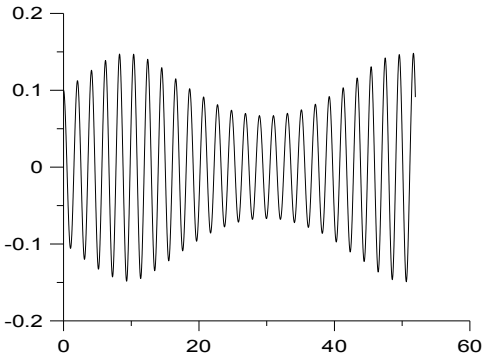


Рис. 2..Параметричні коливання при $a_1(0) = 0,1$

Як видно з рисунку амплітуда коливань за основною антисиметричною формою a_1 зміню-

ється в часі і набуває періодично свого максимального значення порядку 0,15.

Розглянемо для порівняння випадки початкових умов $a_1(0) = 0{,}04$ (Рис. 3) і $a_1(0) = 0{,}005$ (Рис. 4).

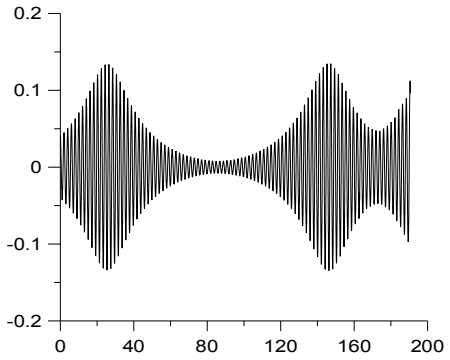


Рис. 3..Параметричні коливання при $a_1(0) = 0{,}04$

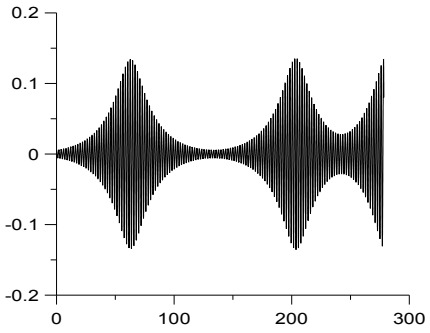


Рис. 4..Параметричні коливання при $a_1(0) = 0{,}005$

Аналіз чисельних результатів показує, що максимальні розмахи коливань в усіх випадках залишаються практично незмінними і приблизно дорівнюють $0{,}15R$. В той же час графіки показують, що вихід на режим усталених коливань не відбувається: для всіх початкових умов вагомою є модуляція коливань. Відмітимо, що цей результат відрізняється від результатів робіт [2, 4], де розглядаються параметричні коливання в резервуарах з рідиною на основі моделей з рядом спрощуючи гіпотез і без прийняття до уваги фактору сумісності руху складових системи.

Зазначимо, що розглянуті задачі моделювалися згідно з класичною постановкою задачі Фарадея за умови виключення руху резервуару в горизонтальній площині. Це суттєво спрощую проблему і дозволяє відразу визначити частотний діапазон прояву параметричного резонансу, який не залежить від співвідношення мас резервуару і рідини.

Проаналізуємо тепер збурення другої форми коливань вісесиметричної форми, яка є проявом збудження нелінійних механізмів в системі. На Рис. 5 показано закон зміни в часі амплітуди цієї форми.

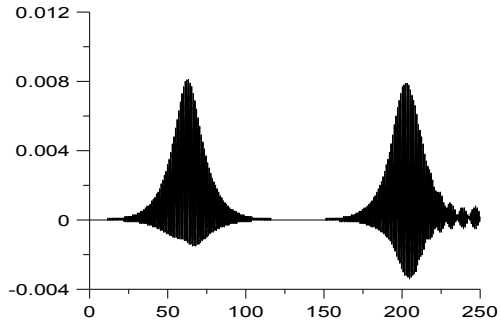


Рис. 5..Параметричні коливання за вісесиметричною формою при $a_1(0) = 0{,}04$

Як видно з рисунку в цілому збудження за другою формою не є значним, тобто розвиток нелінійностей в системі при таких параметричних коливаннях незначний. Звернемо увагу, що для всіх графіків амплітуди послідовних піків є приблизно однаковими. Звернемо увагу, що коливання за другою формою суттєво модульовані. На відміну від коливань по першій формі помітний дрейф середнього значення; при коливаннях переважають амплітуди з додатнім відхиленням. Це свідчить про те, що серед хвиль на вільній поверхні переважно будуть спостерігатися хвилі, в яких буде опускання профілю хвиль всередині і зростання амплітуд на стінках резервуару. Ця властивість нелінійного хвилеутворенняпідтерджується експериментально.

Розглянемо тепер випадок збудження параметричних коливань системи з амплітудою 0,2 (тобто амплітуду зменшено в 3,5 рази). Результати визначення зміни амплітуди коливань вільної поверхні за першою антисиметричною формою в часі представлені на Рис. 6.

Як і в попередніх випадках вихід на усталений режим коливань не спостерігається. Коливання суттєво промодульовані. Період модуляції сильно збільшився. Час виходу коливань на максимальне значенні істотно змінився. Зміна максимальної амплітуди відбулася приблизно в 2 рази (при зміні амплітуди збудження в 3,5 рази).

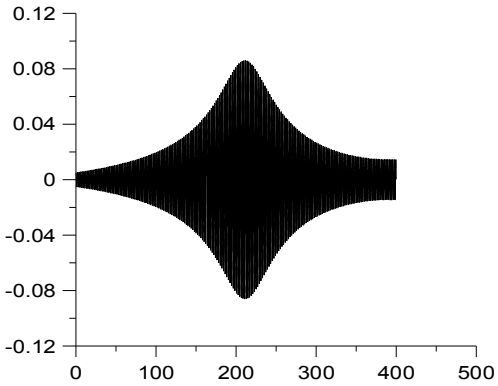


Рис. 6..Параметричні коливання при $a_1(0) = 0{,}005$, і амплітуді збудження 0,2

Висновки

Розглянуто задачу про параметричні коливання рідини з вільною поверхнею в резервуарі конічної форми. На відміну від класичної постановки задачі Фарадея рух системи збуджується повздовжньою гармонічною силою, проте рух резервуару в поперечній площині виключений.

Встановлено, що при розвинені параметричних коливань в околі подвоєної частоти коливань системи по першій антисиметричній формі вихід системи на усталені коливання не спостерігається. При незмінній амплітуді гармонічного силового збудження руху час і амплітуда максимального збурення системи по першій формі практично не залежать від початкових відхилень системи по антисиметричній формі. Коливання по першій формі відбуваються при суттєвому прояві модуляції. Коливання по першій віссиметричній формі також сильно промодульовані, проте додатково ще вагомо проявляється дрейф середнього значення коливань, який призводить до того, що переважно спостерігаються хвилі, в яких висота горба перевершує глибину впадини. В цілому збудження нелінійностей в системі незначне. При зміні амплітуди збудження резервуару час і амплітуда прояву максимальних коливань за першою формою змінилися, проте вихід на усталений режим коливань не спостерігається через суттєвий прояв модуляції.

Частина одержаних результатів відрізняється від раніше одержаних результатів, які розглядалися при додаткових спрощуючи припущеннях і без врахування фактору сумісності руху складових системи.

Список використаних джерел

1. *Константинов А.В.* Исследование параметрического резонанса в задаче М. Фарадея при наличии слабых гравитационно-капиллярных эффектов / А.В. Константинов, О.С.Лимарченко// Проблемы динамики и устойчивости многомерных систем, Праці Інституту математики. – 2011. –**8**. – № 2. –С. 83-100
2. *IkedaT.* Autoparametric resonances in a structure/fluid interaction system carrying a cylindricalliquidtank/ T.Ikeda, Sh.Murakami// Journal of Sound and Vibration. – 2005. –**285**.–P. 517–546
3. *Limarchenko O.S.*Peculiarities of application of perturbation technology in problems of nonlinear oscillations of liquid with a free surface in cavities of non-cylindrical shape / *O.S.Limarchenko*// Ukrainian Math. Journ. – 2007. – **59**. – No. 1. – P. 44-70.
4. *Ibrahim R.A.* Liquid Sloshing Dynamics: Theory and Applications / *R.A.Ibrahim* // Cambridge Univ. Press. – 2005. – 972 p.

References

1. KONSTANTINOVA.V.and LIMARCHENKO. S.(2011) Issledovanie parametricheskogo rezonansa v zadache M. Faradeya pri nalichii slabykh gravitatsionnykh effektov. In *Problemy dinamiki i ustoichivosti mnogomernykh system. Pratsi Institutu matematiki,*V. 8, No. 2, pp. 83-100
2. IKEDAT.and MURAKAMI SH. (2005)Autoparametric resonances in a structure/fluid interaction system carrying a cylindrical liquid tank. In *Journal of Sound and Vibration*, **285,**pp. 517–546
3. LIMARCHENKO O.S. (2007)*Peculiarities of application of perturbation technology in problems of nonlinear oscillations of liquid with a free surface in cavities of non-cylindrical shape.*In *Ukrainian Math. Journ.*,V. 59, No. 1, pp. 44-70.
4. IBRAHIM R.A.(2005) *Liquid Sloshing Dynamics: Theory and Applications,* Cambridge Univ. Press.

Надійшла до редколегії 22.09.14

УДК 539.595

Лимарченко О.С. [1], д.т.н., проф..
Семенович К.О. [1], аспірант

Поверхневе хвилеутворення в системі резервуар–рідина при кутовому збуренні руху резервуару

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка,03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4е,
e-mail: olelim2010@yahoo.com
e-mail: kateryna.semenovych@gmail.com

O.S. Limarchenko[1], doctor of eng., prof.
K.O. Semenovych[1], graduate student

Surface sloshing in the system reservoir–liquid for the case of angular excitation of reservoir motion

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova st., 4e,
e-mail: olelim2010@yahoo.com
e-mail: kateryna.semenovych@gmail.com

Розглядається задача про рух циліндричного резервуару на маятниковому підвісі, частково заповненого ідеальною рідиною. Збудження руху відбувається з положення спокою за рахунок імпулсного прикладення моменту. Досліджено перерозподіл кінетичної енергії в системі і пояснено згасання поверхневого хвильового руху. Вказані результати якісно збігаються з екпериментальними даними.

Ключові слова: нелінійна динаміка рідини, вільна поверхня рідини, кутовий рух резервуара, циліндричний резервуар.

Dynamics of a cylindrical reservoir on pendulum suspension, partially filled with an ideal liquid, is considered. Mathematical modeling is done on the basis of multimodal model, which takes into account combined character of motion of liquid and reservoir and comparatively great number of sloshing normal modes. Disturbance of motion was done by impulse of torque, applied to the reservoir. Redistribution of kinetic energy between different modes of liquid motion and parameters of angular motion of reservoir as well as varying of these parameters in time was investigated. Decay of surface sloshing processes is explained on the basis of insertion of dissipative forces, which is done according to boundary layer approximation. Results of numerical modeling qualitatively coincide with experimental data, obtained by laboratory experiment. We investigate also variation in time of kinematic parameters of motion of liquid and angular of inclination of reservoir for different values of dissipation forces. It was shown that only in the case of considering of dissipation factors the discovered effect of decay of liquid oscillations is agreed with the experiment.

Key Words: nonlinear liquid dynamics, liquid free surface, angular motion of reservoir, cylindrical tank .

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Жук Я.О.

Вступ

Розглядається рух резервуару, частково заповненого рідиною, на маятниковому підвісі. В початковий момент часу система знаходиться в стані спокою. Збурення руху забезпечується імпульссом моменту тривалістю 1 с.

Було проведено серію лабораторних дослідів, під час яких було виявлено наступний ефект: впродовж 5–7 періодів коливань резервуару після початку руху коливальний рух на вільній поверхні рідини зникає, і надалі поверхня рідини залишається практично плоскою. Поясненням цього може бути перерозподіл енергії в розглядуваній системі між різними формами руху. Для аналізу вказаного явища було побудовано математичну модель та проведено чисельні експерименти. Одержані результати порівнювалися з якісними даними лабораторного експерименту і було одержане добре узгодження.

Математична модель

Для дослідженні задачі використаємо математичну модель системи [2, 3]. Рідина вважається ідеальною, однорідною, нестисливою, а її рух безвихровим. Метод ґрунтується на формулюванні задачі в вигляді варіаційного принципу Гамільтона–Остроградського та використанні методу Канторовича з попереднім виключенням кінематичних граничних умов на вільній поверхні рідини для побудови дискретної моделі системи. До розгляду приймались 12 форм коливань ріди-

© О.С. Лимарченко, К.О. Семенович, 2014

ни. Рух системи збуджується моментом у вигляді імпульсу прямокутної форми тривалістю 1 с, його амплітуда підбирається таким чином, щоб максимальні амплітуди коливань вільної поверхні знаходились в діапазоні $0{,}2R - 0{,}3R$, де R – радіус резервуару. Для побудови нелінійної дискретної моделі системи резервуар–рідина були введені наступні узагальнені координати: a_i – амплітуди збудження форм коливань рідини; α_i – кути відхилення резервуару; ε_i – параметри поступального руху резервуару. Зауважимо, що наведений опис придатний для загального випадку просторового руху системи. Для випадку кутового руху резервуару на маятниковому підвісі, який є предметом розгляду даної роботи, параметри поступального руху відсутні.

Математичне формулювання задачі про рух циліндричного резервуару, заповненого рідиною з вільною поверхнею, складається з кінематичних умов, динамічних рівнянь та початкових умов. Для досліджуваної системи до кінематичних умов відноситься вимога нерозривності потоку в області, умова непротікання на границі контакту резервуар–рідина та умова непротікання через вільну поверхню рідини. Динамічні граничні умови та рівняння руху отримано застосуванням принципу Гамільтона–Остроградського для Лагранжіану системи, що представлений в наступному вигляді [3]

$$L = \frac{1}{2}\rho\int_{\tau}\left[\vec{\nabla}\varphi + \vec{\nabla}(\vec{\omega}\cdot\vec{\Omega})\right]^2 d\tau + \frac{1}{2}M_r(\dot{\varepsilon})^2 +$$

$$+\frac{1}{2}I^{ij}_{res}\omega_i\omega_j - (M_r + M_l)g\varepsilon_z +$$

$$+\rho g(\cos\alpha_1\cdot\sin\alpha_2\cos\alpha_3 - \sin\alpha_1\sin\alpha_3)$$

$$\cdot\int_{S_0} r\cdot\cos\theta(\xi + H)dS -$$

$$-\rho g(\sin\alpha_1\cos\alpha_3 + \cos\alpha_1\sin\alpha_2\sin\alpha_3)\cdot$$

$$\cdot\int_{S_0} r\cdot\sin\theta(\xi + H)dS - \frac{1}{2}\rho g\cos\alpha_1\cos\alpha_2\cdot$$

$$\cdot\int_{S_0}\xi^2 dS - (M_l h_l + M_r h_r)(1 - \cos\alpha_1\cos\alpha_2) -$$

$$-\sigma\int_{S_0}\sqrt{1 + (\vec{\nabla}\xi)^2}\,dS - \sigma\cos\theta_1\int_{L_0}\xi dl + \vec{F}\cdot\vec{\varepsilon} +$$

$$+\vec{M}\cdot\vec{\chi}.$$

Кінематичні умови розглядаються як кінематичних в'язі відносно варіаційного принципу

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} L dt = 0$$

Для ефективного застосування варіаційних методів необхідно задовольнити цим в'язям до розв'язання варіаційної задачі. Після задовільнення кінематичних граничних умов за методом [3]. Одержується варіаційна задача для вільної системи, для якої записуються рівняння Лагранжа другого роду.

Рівняння руху системи в загальному випадку в параметрах $a_i, \alpha_i, \varepsilon_i$ можна подати наступним чином:

$$\sum_{n=1}^{N} p_{rn}\ddot{a}_n + \sum_{n=N+1}^{N+3} p_{rn}\ddot{\varepsilon}_{n-N} + \sum_{n=N+4}^{N+6} p_{rn}\ddot{\alpha}_{n-N-3} = q_r$$

$$r = \overline{1, N+6} \qquad (1)$$

де p_{rn} і q_r це квадратна матриця та вектор розміру $N+6$ відповідно. Елементи матриці та вектору залежать від форм коливань ψ_i та векторного потенціалу Стокса-Жуковського. За рахунок вибору системи координат з центром в точці підвісу в задачі, що вивчається, відсутні поступальні рухи резервуару, тому розмірність системи рівнянь (1) скорочується до $N+3$.

Особливість даного класу задач полягає в тому, що можна умовно поділити кінетичну енергію системи на складові, які описують різні форми руху в системі. Для того, щоб відповісти на питання про, характер перерозподілу енергії в системі, було розглянуто зміну в часі складових кінетичної енергії системи. Кінетична енергія системи може бути представлена у вигляді

$$T = T_1 + T_2 + T_3$$

Розглядаючи лише ті компоненти кінетичної енергії, які пов'язані з рухом рідини, можна виділити складову T_1, яка відповідає хвильовому руху на вільній поверхні рідини

$$T_1 = \frac{1}{2}\rho\left(\sum_i \dot{a}_i^2\alpha_i^{\nu} + \sum_{i,j,k}\dot{a}_i\dot{a}_j a_k\gamma^{\nu}_{i,j,k} + \sum_{i,j,k,l}\dot{a}_i\dot{a}_j a_k a_l\delta^{\nu}_{i,j,k,l}\right)$$

Складова T_2 кінетичної енергії системи відповідає квазітвердому кутовому руху

$$T_2 = \frac{1}{2}\rho\sum_{p,s=1}^{3}\omega_p\omega_s\left(I_{res} + E^2_{ps} + \sum_i a_i E^2_{psi} + \sum_{i,j} a_i a_j E^3_{psij}\right)$$

Складова T_3 кінетичної енергії системи відображає зв'язок хвильового та квазітвердого кутового руху системи

$$T_3 = \frac{1}{2}\rho\sum_{p=1}^{3}\omega_p\left(\sum_i \dot{a}_i E^{1*}_{pi} + \sum_{i,j}\dot{a}_i a_j E^{2*}_{pij} + \sum_{i,j,k}\dot{a}_i a_j a_k E^{3*}_{pijл}\right).$$

Аналіз чисельних результатів

Розглядаються коливання резервуару радіуса 1 м, заповненого рідиною до рівня 0,5 м. Маса резервуару складає 0,25 маси рідини. Довжина маятникового підвісу 4 м.

Зазначимо, що на основі моделі ідеальної рідини не вдалося одержати підтвердження наявності перерозподілу енергії, який спостерігається в експериментах. Тому в системі було вве-

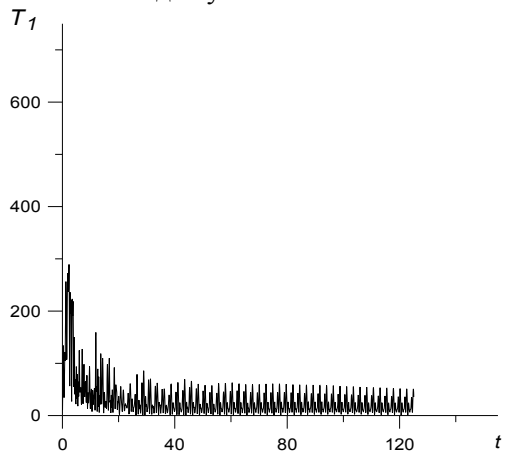


Рис. 1. Графік зміни в часі складової T_1

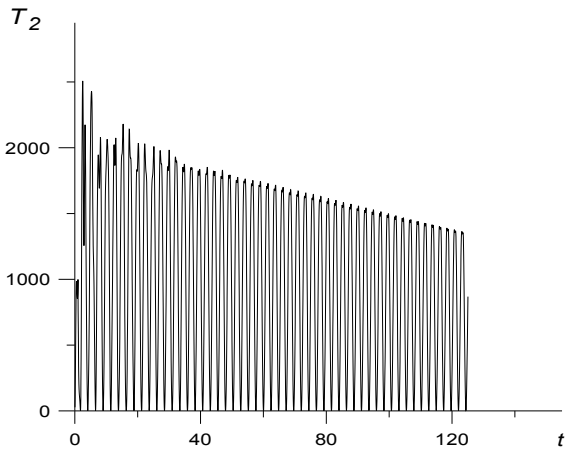


Рис. 2. Графік зміни в часі складової T_2

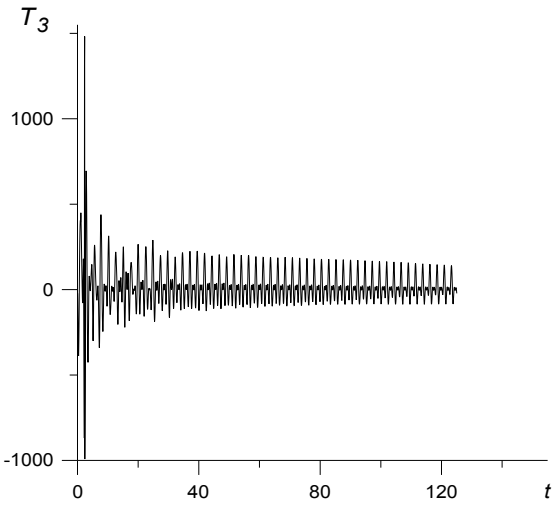


Рис. 3. Графік зміни в часі складової T_3

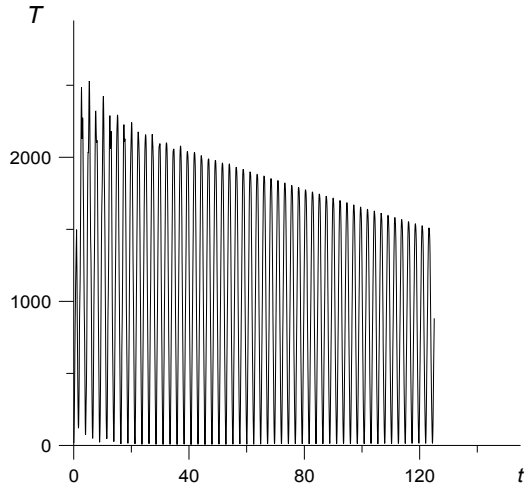


Рис. 4. Графік зміни в часі повної кінетичної енергії T

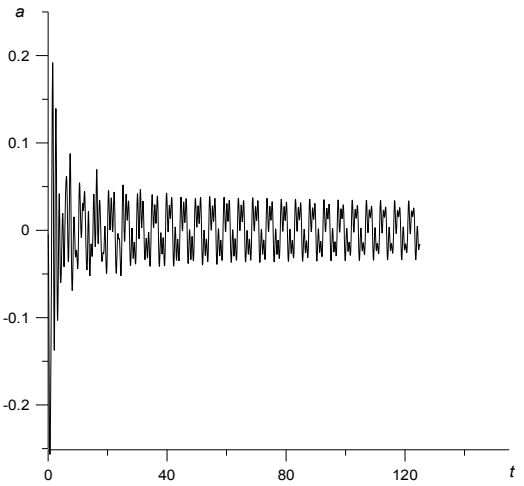


Рис. 5. Зміна в часі амплітуди першої антисиметричної форми коливань рідини

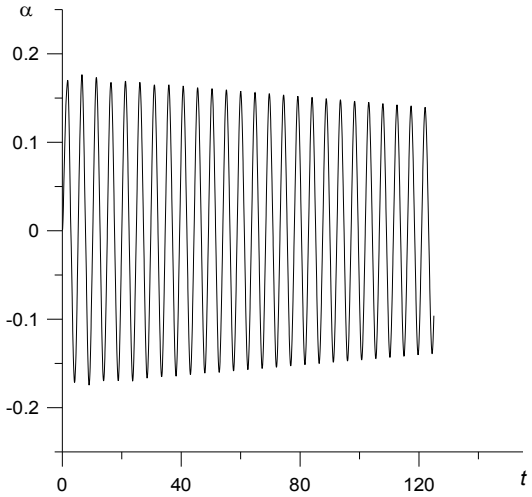


Рис. 6. Зміна в часі кута відхилення резервуару від вертикалі

дено узагальнену дисипацію згідно [1]. Аналіз коефіцієнтів подібності (критерію Рейнольдса) експериментальної та змодельованої систем дозволяє визначити значення коефіцієнту підсилення узагальненої в'язкості $\nu = 46$.

На Рис. 1 – 4 подано графіки зміни в часі складових кінетичної енергії системи T_1, T_2, T_3 та повної кінетичної енергії системи T.

Також розглянемо зміну в часі першої антисиметричної форми коливань рідини (Рис. 5 *а*) та кута відхилення резервуару від вертикалі (Рис. 6), що дозволить проаналізувати рух системи більш повно.

Аналіз результатів і висновки

З графіків видно, що для дійсно має місце ефект перерозподілу енергії між хвильовим рухом та квазітвердим. Перша складова кінетичної енергії системи згасає впродовж декількох періодів коливання резервуару. Одночасно спостерігається зменшення амплітуди першої антисиметричної форми коливань в 4 рази. Разом з цим, згасає і третя складова кінетичної енергії, яка відповідає за зв'язок між хвильовою та квазітвердою кутовою формами рухів. Натомість друга складова, що описує квазітвердий рух системи, дещо знижується, але прямує до сталого ненульового значення. Відповідно кутові коливання резервуару з часом згасають дуже повільно.

Ці результати дозволяють говорити про наявність перерозподілу енергії між хвильвим рухом та квазітвердим кутовим. Зауважимо, що такий перерозподіл наявний лише при застосуванні нелінійного підходу з введеною узагаліненою дисипацією. Розрахунки для випадку без дисипації не дали бажаних результатів. Одержані результати добре узгоджуються з якісними результатами лабораторних дослідів, що, зокрема, є свідченням адекватності розробленої математичної моделі [3] і сукупності механічних гіпотез, на яких вона ґрунтується.

Список використаних джерел

1. *Микишев Г.Н.* Экспериментальные методы в динамике космических аппаратов / Г.Н. Микишев – Москва: Машиностроение, 1978. – 246 с
2. *Семенович К.О.*, Перехідний рух резервуара на маятниковому підвісі при кінематичних та силових збуреннях / К.О Семенович // Сучасні математичні методи досліджень в механіці. Збірник матеріалів наукової школи-семінару, Київ, 8-11 жовтня 2012. – Київ, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, «Адверта». – 2012. – С. 32-37
3. *Лимарченко О.С.* Динамика вращающихся конструкций с жидкостью / О.С Лимарченко, Дж. Матараццо, В.В. Ясинский. – Киев: "Гнозис", 2002. – 304 с.

References

1. MIKISHEV G.N. (1978) *Eksperimentalnye metody v dinamile kosmicheskikh apparatov.* Moskva: Mashinostroenie.
2. SEMENOVYCH K.O. (2012) Perekhodnoe dvizhenie reservuara na mayatnikovom podvese pri kinematicheskikh i silivykh vozmushcheniyakh In *Suchasni matematychni metody doslidzhen v mekha-nitsi,* Scientific school–seminar 8-11 October 2012. Kyiv: Kyiv National Taras Shevchenko University, Adverta. pp. 32-37
3. LIMARCHENKO O.S., MATARAZZO G., YASINSKIY V.V. (2002) *Dinamika vrashchayushchikhsya konstruktsiy s zhidkostyu.* Kiev, Gnozis.

Надійшла до редколегії 02.06.14

УДК 539.595

Лимарченко О.С.[1], д.т.н., проф..
Тімохін О.П.[1], аспірант

Аналіз впливу сил Коріоліса і нелінійностей на динаміку трубопроводу

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка,03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4е, e-mail: olelim2010@yahoo.com

O.S. Limarchenko[1], doctor of eng., prof.
O.P. Timokhin[1], graduate student

Analysis of the Coriolis force and nonlinearities effect on dynamics of pipeline

[2]Taras Shevchenko Kiev National University, 03680, Kyiv, Glushkov ave., 4e,
e-mail: olelim2010@yahoo.com

Розглядається задача про влив сил Коріоліса і нелінійних механізмів на формування динамічних процесів в трубопроводі, в якому тече рідина. Досліджено два режими швидкостей течії: течія із швидкістю трохи менша за критичну і закритичний режим. Показано як вказані механізми порізному визначають властивості системи.

Ключові слова: динаміка трубопроводу з рідиною, сили Коріоліса, нелінійності.

The problem about influence of the Coriolis forces and nonlinear mechanisms on formation of dynamical processes in pipeline with flowing liquid is under consideration. Modeling is done on the basis of nonlinear multimodal model, which takes into account 12 normal modes and combined character of motion of pipeline and liquid. Two modes of velocities of liquid were considered, namely, 0,9 and 1,5 of critical velocity of liquid. It was shown that mainly the Coriolis forces provide energy redistribution in the system, but nonlinearities are responsible for installation of mode of system oscillation relative to the so-called alternative position of dynamical equilibrium, which considerably changes system behavior from point of view of stability of motion. Preliminarily prediction of liquid behavior is done on the basis of linear model with four degrees of freedom. Predicted results were confirmed by nonlinear model with twelve degrees of freedom on the basis of modeling of particular cases of transient processes in pipeline with liquid flow with velocities before and after the first critical velocity.

Key Words: dynamics of pipeline with liquid, Coriolis forces, nonlinearities.

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Жук Я.О.

Вступ

В задачах динамки трубопроводів з рідиною, що тече, одним з найменш досліджених є поведінка трубопроводу з рідиною в околі критичних швидкостей і особливо при швидкостях, що перевершують критичні. Складність таких режимів обумовлена тим, що математичні задачі для таких режимів є нестійкими і система допускає наявність так званого альтернативного положення динамічної рівноваги [3–5]. Дослідження динамічної стійкості таких систем дозволяє зробити висновок, який відрізняється від висновків раніше проведених досліджень: в закритичному діапазоні система знову стає стійкою, але вже відносно не прямолінійного незбуреного стану рівноваги, а відносно альтернативного положення рівноваги. Проте, при зростанні збурень коливання можуть розвиватися таким чином, що система може переходити від коливань навколо прямолінійного стану трубопроводу до коливань відносно двох симетрично розташованих відносно незбуреного стану альтернативних положень рівноваги. Цікком природно очікувати зміну ролі сил Коріоліса і нелінійностей в прерозподілі енергії в системі.

Метою роботи є аналіз впливу сил Коріоліса і нелінійностей на формування динамічних процесів при закритичних швидкостях течії і порівняння одержаних результатів з випадком докритичних швидкостей течії рідини.

Постановка задачі

Математичне моделювання задачі здійснюється на основі нелінійної моделі сумісного руху рідини і трубопроводу, яка включає велику кількість форм коливань. Поведінка трубопроводу розглядається на основі балочної моделі, що відповідає випадкам видовжених (по відношенню до

© О.С. Лимарченко, О.П. Тімохін, 2014

діаметра труби) трубопроводв. В системі враховані всі відомі нелінійні ефекти, що впливають на формування динамічних процесів.

Загальний вид рівнянь руху системи трубопровід – рідина в амплітудних параметрах збудження форм коливань буде таким [1-2]

$$\ddot{c}_r N_r + \frac{1}{2}\sum_{ijk} \ddot{c}_i c_j c_k \, d^2_{jkir} + \sum_{ijk} \dot{c}_i \dot{c}_j c_k \left(d^2_{jkir} - \frac{1}{2} d^2_{krij} \right) +$$

$$+ \frac{EJ}{\rho+\mu} c_r N_r \kappa_r^4 + \frac{EJ}{\rho+\mu} \sum_{ijk} c_i c_j c_k \, d^6_{ijkr} +$$

$$+ \frac{EF}{2(\rho+\mu)} \sum_{ijk} c_i c_j c_k d^4_{ijkr} + \frac{13}{4} \frac{\rho V^2}{\rho+\mu} \sum_{ijk} c_i c_j c_k d^4_{ijkr} -$$

$$- \frac{7}{2} \frac{\rho V^2}{\rho+\mu} \sum_i c_i \beta^2_{ir} + \frac{2\rho V}{\rho+\mu} \sum_i \dot{c}_i \left(\beta^1_{ir} - \beta^1_{ri} \right) +$$

$$+ \frac{PF}{\rho+\mu} \sum_i c_i \beta^2_{ir} + \frac{2\rho \dot{V}}{\rho+\mu} \sum_i c_i \beta^1_{ir} = 0 .$$

При цьому поперечні відхилення трубопроводу в мають вигляд $u(x,t) = \sum_{i=1}^{N} A_i(x) c_i(t)$, де ρ і μ – лінійні густини рідини і трубопроводу, EJ – згинна жорсткість трубопроводу, F – площа поперечного перерізу трубопровода, J – меридіанальний момент інерції перерізу трубопроводу, N_r, d^2_{jkir}, d^6_{ijkr}, d^4_{ijkr}, β^2_{ir}, β^1_{ir} – квадратури від форм коливань трубопроводу $A_i(x)$ як консольно закріпленої балки, κ_r^4 – частотный параметр. В цих рівняннях силі Коріоліса відповідає член $\frac{2\rho V}{\rho+\mu} \sum_i \dot{c}_i \left(\beta^1_{ir} - \beta^1_{ri} \right)$, а члени з квадратурами $d^2_{jkir}, d^4_{ijkr}, d^6_{ijkr}$ представляють собою нелінійні силові фактори.

Результати чисельного моделювання

Розглядаються два режима течії рідини при початковому відхиленні по першій формі на 2% від довжини труби: $V = 0.9 \cdot V^1_{kp}$ і $V = 1.5 \cdot V^1_{kp}$. При цьому варіант 1 відповідає лінійній моделі без врахування сил Коріоліса (Рис. 1 *а*), варіант 2 відповідає лінійній моделі з врахуванням сил Коріоліса (Рис. 1 *б*), варіант 3 відповідає нелінійній моделі без врахування сил Коріоліса (Рис. 1 *в*), а варіант 4 відповідає повній моделі, в якій враховані всі фактори (Рис. 1 *г*).

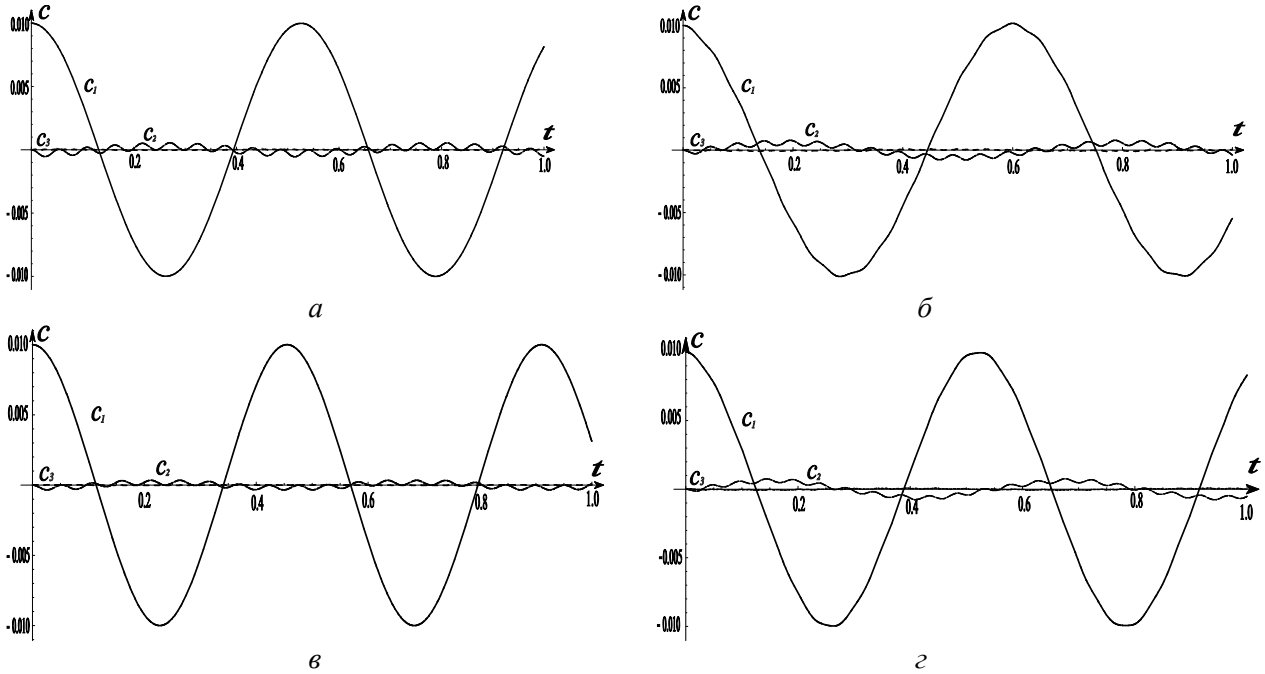


Рис. 1. Амплітуди перших трьох форм коливань трубопроводу $c_1(t), c_2(t), c_3(t)$

З малюнків помітно, що в линійній системі, де не враховано сили Коріоліса і нелінійні фак.-тори, ефект взаємовпливу форм коливань практично відсутній. Наявність нелінійних факторів також не чинить суттєвого впливу на характер коливального процесу – частота зміни амплітуди першої форми зростає, проте взаємовплив форм все ж відсутній.

В свою чергу наявність сил Коріоліса навіть в чисто лінійній системі приводить до енергообміну між формами коливань в трубопроводі, взаємний вплив форм стає помітним.

Таким чином, на основі проведеного моделювання можна зробити висновок, що в режимах течії рідини з докритичними швидкостями сили Коріоліса є основним механізмом энергообміну між формами коливань і вони вносять в характер поведінки системи трубопровід – рідина більш вагомий внесок ніж нелінійні силові фактори.

Перейдемо тепер до розгляду закритичного режиму течії рідини. Аналогічно попереднім варіантам розглянуто чотири випадки моделювання поведінки системи для швидкості течії $V = 1.5 \cdot V_{kp}^1$ (Рис. 2). Нумерація варіантів обрана аналогічно Рис. 1. З Рис. 2 помітно, що в закритичній області розв'язок, одержаний на основі лінійної моделі, очікувано веде себе нестійко – амплітуди всіх трьох форм аперіодично зростають з часом. Також встановлено, що врахування сил Коріоліса не є стабілізуючим фактором.

В свою чергу врахування нелінійних механізмів приводить до обмеження області нестікості коливань – амплітуда першої форми не зростає аперіодично до нескінченості, а здійснює стійкі коливання навколо альтернативного положення динамічної рівноваги, що помітно з графіків як зміщення середнього значення коливань для амплітуди c_1, а амплітуда c_2 продовжує здійснювати коливання навколо прямолінійної форми трубопроводу.

Порівняння рисунків *в* і *г* свідчить, що внесення в систему сил Коріоліса призводить до збільшення періоду коливань за першою формою. В той же час помітно, що саме нелілійності сприяють зростанню впливу вищих гармонік на формування динамічних процесів в системі.

Включення в модель всіх механізмів одночасно приводить в закритичній області до результатів подібних до випадку докритичних швидкостей – сили Коріоліса виконують основну роль в енергообміні між формами коливань, проте стійкість системи визначається тим, що коливання відбуваються відносно альтернативного положення динамічної рівноваги, яке обумовлене нелінійними механізмами.

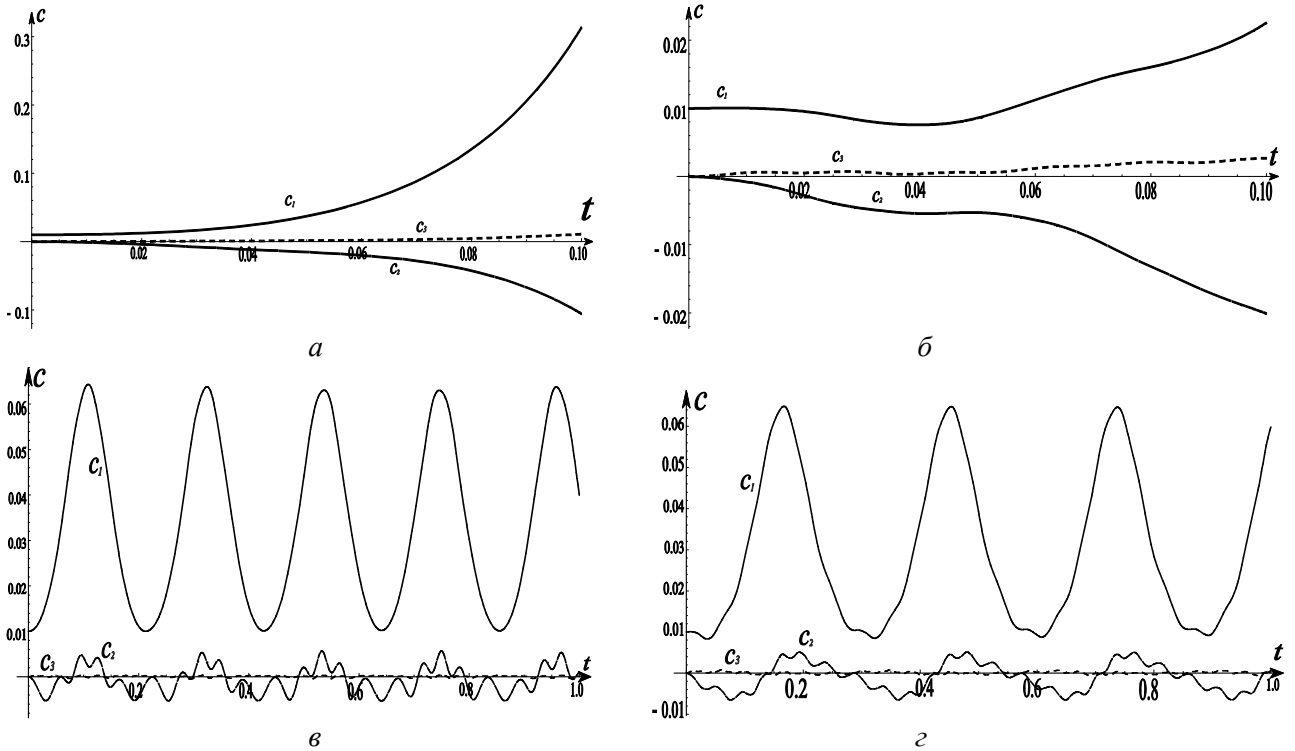


Рис. 2. Амплітуди перших трьох форм коливань трубопроводу $c_1(t), c_2(t), c_3(t)$

Висновки

На основі нелінійної багатомодової математичної моделі динаміки пружного трубопроводу з рідиною, що тече, проведене дослідження поведінки системи при виділенні впливу нелінійних механізмів і сил Коріоліса для докритичного і закритичного режимів течії рідини.

Результати розрахунків дозволяють зробити висновок, що сила Коріоліса для всіх швидкісних режимів течії рідини є основним фактором енергообміну між формами коливань в системі трубопровід – рідина. З іншого боку нелінійні механізми в системі трубопровід – рідина є основним фактором, який визначає характер стійкості системи в закритичних режимах течії рідини. Нелінійні механізми впливають також на прояв впливу вищих гармонік коливань.

Включення в модель всіх механізмів одночасно приводить в закритичній області до результатів подібних до випадку докритичних швидкостей – сили Коріоліса виконують основну роль в енергообміні між формами коливань, проте стійкість системи визначається тим, що коливання відбуваються відносно альтернативного положення динамічної рівноваги, яке обумовлене нелінійними механізмами.

Список використаних джерел

1. *Василевский Ю.Є.* Нелинейная модель динамики трубопровода при скоростном течении жидкости / Ю.Є. Василевский, О.С. Лимарченко // Збірник праць Інституту математики НАН України.– Київ: Інститут математики НАН України. – 2006. – **2**, № 4. – С. 322-334.
2. *Василевський Ю.Є.* Нелінійна динаміка трубопроводу з рідиною в околі критичних швидкостей течії / Ю.Е. Василевський, О.С. Лимарченко // Вісник Київського університету. – Сер.: Фізико-математичні науки. – 2009. – №1. – С.41-46.
3. *Ibrahim R.A.* Mechanics of Pipes Conveying Fluids—Part II: Applications and Fluidelastic Problems / Ibrahim R. A. // Journal of Pressure Vessel Technology, 2011.– Vol. 133,–P. 024001-0240030.
4. *Paidoussis M.P.* A horizontal fluid-conveying cantilever: spatial coherent structures, beam modes and jumps in stability diagram / M.P. Paıdoussis, A. Sarkar, C. Semler //Journal of Sound and Vibration, 2005.– No. 280.– P.141-157.
5. *Tijsseling A.S.* Fluid-structure interaction in liquid-filled pipe systems: sources, solutions and unsolved problems / Tijsseling A.S. // Eindhoven University of Technology, Report for EDF, 2002. – 50 p.

References

1. VASILEVSKIY Yu.E., LIMARCHENKO O.S. (2006) Nelineinaya model dinamiki truboprovoda pri skorostnom techenii zhidkosti In *Sbornik trudov Instituta matematiki NAN Ukrainy,* **2**, No. 4, pp. 322-334.
2. VASILEVSKIY YU.E., LIMARCHENKO O.S. (2009) Nelineinaya dinamiki truboprovoda s zhidkostyu v okrestnosti kriticheskikh skorostei techeniya In *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series Physics & Mathematics,* No. 1, pp. 41-46.
3. IBRAHIM R.A. (2011) Mechanics of Pipes Conveying Fluids—Part II: Applications and Fluidelastic Problems. In *Journal of Pressure Vessel Technology*,. **133**, pp. 024001-0240030.
4. PAIDOUSSIS M.P., SARKAR A., SEMLER C (2005). A horizontal fluid-conveying cantilever: spatial coherent structures, beam modes and jumps in stability diagram In *Journal of Sound and Vib-ration*,.No. 280, pp.141-157.
5. TIJSSELING A.S. (2002) *Fluid-structure interaction in liquid-filled pipe systems: sources, solutions and unsolved problems* Eindhoven University of Technology.

Надійшла до редколегії 01.06.14

УДК 539.3

Острик В. І.[1], д. ф.-м. н., проф.
Улітко А. Ф.[1], д. ф.-м. н., проф., член-кор. НАН України

Ковзний контакт з довантаженням двох штампів і пружної півплощини

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
03680, м. Київ, просп. Глушкова, 4 е,
e-mail: ostrik_v@rambler.ru

V. I. Ostryk[1], Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof.,
A. F. Ulitko[1], Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Cor. Memb. of NASU

Sliding contact with added stresses of two stamps and elastic half-plane

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova st., 4 e,
e-mail: ostrik_v@rambler.ru

Розглянуто контактну взаємодію двох штампів з прямолінійною горизонтальною основою і пружної півплощини, яка довантажена зосередженою нормальною силою на рівній відстані від штампів. Враховано сили тертя в області контакту за умови повного проковзування граничних точок півплощини уздовж основ штампів. Задача зведена до сингулярного інтегрального рівняння на системі двох інтервалів, розв'язок якого отримано в аналітичному вигляді. Знайдено інтервал можливих значень довантажувальної сили. Показано, що за відсутності довантаження повне проковзування основ штамів і півплощини не має місця.

Ключові слова: контакт, пружна півплощина, штампи, довантаження.

Contact interaction of two stamps having straight horizontal base with an elastic half-plane has been considered when the half-plane is loaded by the concentrated normal force at the equal distance from the stamps. Friction forces in the contact area are included at the condition of full slipping of boundary points of the half-plane along the stamps. The problem is reduced to a singular integral equation for the function of the contact pressure at the set of two intervals, the solution is obtained in analytical form. A range of possible values of added normal force of the half-plane is found, for which the full contact and frictional sliding of stamps boundaries along the half-plane take place. It is shown that in the absence of added stresses, as well with the relatively small concentrated force, the full slip of the boundaries of stamps does not take place and the problem should be considered in the complicated formulation with some adhesion contact areas taken into account.

Key Words: contact interaction, elastic half-plane, stamps, added stresses.

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Жук Я. О.

Вступ

Контакт абсолютно жорсткого штампа з пружним тілом у випадку, коли до межі тіла прикладене додаткове навантаження (частіше за все, у вигляді зосередженої нормальної сили), у теорії контактних задач носить назву контакту з довантаженням. Гладкий контакт кругового штампа з пружним півпростором, довантаженим зосередженою силою, розглядався в роботі [1]. Аналогічна задача у випадку, коли основа штампа зчеплена з межею півпростору розв'язана у [2]. Контактні задачі з довантаженням для пружної півплощини без урахування сил тертя в області контакту вивчені в роботах [3-5]. Ковзний контакт, тобто контакт з урахуванням сил тертя в області контакту, за наявності довантаження раніше не розглядався. Не розглядався також контакт з довантаженням для системи штампів.

Постановка задачі

Два штампи з прямолінійною горизонтальною основою $-a \le x \le -b$ і $b \le x \le a$ ($y = 0$) з'єднані між собою і вдавлюються як єдине ціле у пружну півплощину нормальною силою P (рис. 1). Межа

© В. І. Острик, А. Ф. Улітко, 2014

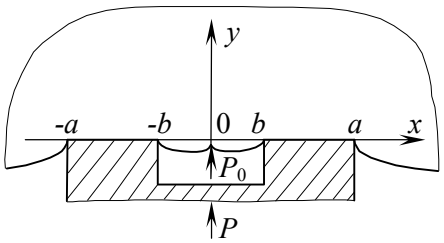


Рис. 1. Схема задачі

півплощини у точці $x=0$ довантажена нормальною силою P_0. Враховуючи сили тертя, вважаємо, що проковзування граничних точок півплощини в області контакту відбувається у напрямку до точки прикладання сили P_0, тобто вправо на лівому штампі та вліво на правому. Таке припущення знаходиться у відповідності з розв'язком аналогічної задачі гладкого контакту, у якій повздовжня деформація межі півплощини відсутня поза областю контакту і є деформацією стиску в області контакту [6].

Крайові умови задачі наступні:

$$u_y\Big|_{y=0}=0,\quad \tau_{xy}\Big|_{y=0}=\operatorname{sign}x\cdot\mu_0\,\sigma_y\Big|_{y=0}\quad (b<|x|<a),$$

$$\sigma_y\Big|_{y=0}=-P_0\delta(x),\quad \tau_{xy}\Big|_{y=0}=0\quad (|x|<b,\ |x|>a),\quad (1)$$

де μ_0 – коефіцієнт тертя, $\delta(x)$ – дельта-функція Дірака.

Розв'язання контактної задачі

Для розв'язання контактної задачі з крайовими умовами (1) скористаємося сингулярними інтегральними співвідношеннями [6]:

$$\left.\frac{\partial u_x}{\partial x}\right|_{y=0}=-(1-2\nu)p(x)+2(1-\nu)\frac{1}{\pi}\int_{-a}^{a}\frac{q(s)}{s-x}ds,$$

$$\left.\frac{\partial u_y}{\partial x}\right|_{y=0}=2(1-\nu)\frac{1}{\pi}\int_{-a}^{a}\frac{p(s)}{s-x}ds+(1-2\nu)q(x),\quad (2)$$

в яких

$$p(x)=-\frac{1}{2G}\sigma_y\Big|_{y=0},\quad q(x)=-\frac{1}{2G}\tau_{xy}\Big|_{y=0},\quad (3)$$

де G – модуль зсуву. Функції $p(x)$ і $q(x)$ в області контакту є невідомими функціями контактного тиску та дотичних зусиль і завдяки другій крайовій умові (1) зв'язані лінійною залежністю

$$q(x)=\operatorname{sign}x\cdot\mu_0 p(x)\quad (b<|x|<a).\quad (4)$$

Поза областю контакту

$$p(x)=\frac{P_0}{2G}\delta(x),\quad q(x)=0\quad (|x|<b,\ |x|>a).\quad (5)$$

Задовольнивши за допомогою другого співвідношення (2) здиференційовану першу крайову умову (1) і врахувавши при цьому рівності (4), (5), отримаємо сингулярне інтегральне рівняння на системі інтервалів $L=\{-a<x<-b\}\cup\{b<x<a\}$:

$$\alpha(x)p(x)+\frac{1}{\pi}\int_L\frac{p(s)}{s-x}ds=\frac{P_0}{2\pi G}\frac{1}{x}\quad (x\in L),\quad (6)$$

$$\alpha(x)=\alpha\cdot\operatorname{sign}x,\quad \alpha=\frac{\mu_0(1-2\nu)}{2(1-\nu)}.$$

Розв'язок інтегрального рівняння (6) знаходимо у вигляді [7]:

$$p(x)=\frac{P_0\cos\pi\gamma}{2\pi G}\left(\frac{\sin\pi\gamma}{|x|}-\right.$$

$$\left.-\frac{\operatorname{sign}x\cdot\cos\pi\gamma}{(a^2-x^2)^{1/2-\gamma}(x^2-b^2)^{1/2+\gamma}}\frac{1}{\pi}J(x)\right)+$$

$$+\frac{(C_1x+C_2)\operatorname{sign}x}{(a^2-x^2)^{1/2-\gamma}(x^2-b^2)^{1/2+\gamma}}\quad (b<|x|<a),$$

$$\gamma=\frac{1}{\pi}\operatorname{arctg}\alpha,$$

$$J(x)=\left(\int_b^a-\int_{-a}^{-b}\right)\frac{(a^2-s^2)^{1/2-\gamma}(s^2-b^2)^{1/2+\gamma}}{s(s-x)}ds.\quad (7)$$

Для обчислення інтеграла $J(x)$ зведемо його до інтегралу по проміжку $b<s<a$ і виконаємо заміну $s^2=(a^2+b^2)/2+\tau$. Тоді

$$J(x)=\frac{1}{x}\int_{-(a^2-b^2)/2}^{(a^2-b^2)/2}\left(\frac{a^2-b^2}{2}-\tau\right)^{1/2-\gamma}\left(\frac{a^2-b^2}{2}+\tau\right)^{1/2+\gamma}\times$$

$$\times\left(\frac{1}{\tau+(a^2+b^2)/2-x^2}-\frac{1}{\tau+(a^2+b^2)/2}\right)d\tau.\quad (8)$$

Скориставшись значеннями інтеграла [8]:

$$\int_{-c}^{c}(c-\tau)^{1/2-\gamma}(c+\tau)^{1/2+\gamma}\frac{d\tau}{\tau-t}=\frac{\pi}{\cos\pi\gamma}\times$$

$$\times\left(\begin{cases}\sin\pi\gamma\cdot(c-t)^{1/2-\gamma}(c+t)^{1/2+\gamma}, & |t|<c\\ \operatorname{sign}t\cdot|t-c|^{1/2-\gamma}|t+c|^{1/2+\gamma}, & |t|>c\end{cases}-t-2\gamma c\right),\quad (9)$$

$$c=(a^2-b^2)/2,$$

знайдемо

$$J(x)=\frac{\pi}{\cos\pi\gamma}\frac{1}{x}\Big[\sin\pi\gamma\cdot(a^2-x^2)^{1/2-\gamma}(x^2-b^2)^{1/2+\gamma}-$$

$$-x^2+a^{1-2\gamma}b^{1+2\gamma}\Big].\quad (10)$$

Із (7) з урахуванням (10), ввівши нову довільну сталу $C_1' = 2\pi G C_1/(P_0 \cos\pi\gamma)+1$ і поклавши $C_2=0$ через парність функції $p(x)$, отримаємо

$$p(x) = \frac{P_0 \cos\pi\gamma}{2\pi G} \frac{C_1' x^2 - a^{1-2\gamma} b^{1+2\gamma}}{|x|(a^2-x^2)^{1/2-\gamma}(x^2-b^2)^{1/2+\gamma}} \quad (b<|x|<a). \quad (11)$$

Задовольнивши виразом (11) умову рівноваги кожного із штампів

$$\int_b^a p(x)dx = \frac{P}{4G}, \quad (12)$$

після обчислення відповідних інтегралів шляхом заміни $x^2 = (a^2+b^2)/2 + \tau$ і використання значень інтегралів [8]:

$$\int_{-c}^{c} \frac{d\tau}{(c-\tau)^{1/2-\gamma}(c+\tau)^{1/2+\gamma}} = \frac{\pi}{\cos\pi\gamma},$$

$$\int_{-c}^{c} \frac{1}{(c-\tau)^{1/2+\gamma}(c+\tau)^{1/2-\gamma}} \frac{d\tau}{\tau - t} = -\frac{\pi \operatorname{sign} t}{\cos\pi\gamma} \frac{1}{|t-c|^{1/2+\gamma}|t+c|^{1/2-\gamma}} \quad (|t|>c) \quad (13)$$

знаходимо

$$C_1' = \frac{P}{P_0} + 1. \quad (14)$$

Отже, функція контактного тиску із (11) набуває вигляду

$$p(x) = \frac{\cos\pi\gamma}{2\pi G} \frac{(P+P_0)x^2 - P_0 ab(b/a)^{2\gamma}}{|x|(a^2-x^2)^{1/2-\gamma}(x^2-b^2)^{1/2+\gamma}} \quad (b<|x|<a). \quad (15)$$

На краях штампів контактний тиск необмежений і має характерні для ковзного контакту особливості: з показником $1/2-\gamma$ на вході в контакт ($x=\pm a$) та $1/2+\gamma$ на виході із контакту ($x=\pm b$).

Вимагаючи невід'ємність контактного тиску на краях $x=\pm b$ штампів:

$$\left[(P+P_0)x^2 - P_0 ab(b/a)^{2\gamma}\right]\Big|_{x=\pm b} \ge 0,$$

приходимо до умови повного контакту

$$\frac{P_0}{P} \le \bar{P}_0^{\max}, \quad \bar{P}_0^{\max} = \frac{1}{(a/b)^{1-2\gamma}-1}. \quad (16)$$

З'ясуємо тепер при яких значеннях сили P_0 проковзування точок межі півплощини уздовж основ штампів відбувається у напрямку до точки прикладання сили P_0, як і передбачено постановкою задачі. Для цього достатньо вимагати, щоб горизонтальне переміщення точки $x=b$, $y=0$ півплощини було від'ємним або дорівнювало нулю. Інтегруючи від 0 до b рівність

$$\left.\frac{\partial u_x}{\partial x}\right|_{y=0} = -(1-2\nu)\frac{P_0}{2G}\delta(x) + 2(1-\nu)\frac{2\mu_0}{\pi}\int_b^a \frac{sp(s)}{s^2-x^2}ds \quad (|x|<b, |x|>a),$$

яка випливає із першого співвідношення (2), за умови $u_x|_{y=0,\ x=0} = 0$ знаходимо

$$u_x|_{y=0,\ x=b} = -(1-2\nu)\frac{P_0}{4G} + 2(1-\nu)\frac{\mu_0}{\pi}\int_b^a p(s)\ln\frac{s+b}{s-b}ds \le 0. \quad (17)$$

Звідси з урахуванням (15) отримуємо умову повного проковзування

$$\frac{P_0}{P} \ge \bar{P}_0^{\min}, \quad (18)$$

$$\bar{P}_0^{\min} = \frac{J_1}{\pi^2 \sin\pi\gamma/(2\mu_0^2\cos^2\pi\gamma) - J_1 + ab(b/a)^{2\gamma}J_{-1}},$$

$$J_m = \int_b^a \frac{s^m \ln[(s+b)/(s-b)]}{(a^2-s^2)^{1/2-\gamma}(s^2-b^2)^{1/2+\gamma}}ds \quad (m=\pm 1).$$

Граничні значення $\bar{P}_0^{\min}$, $\bar{P}_0^{\max}$ відношення сил P_0/P, обчислені за формулами (16), (18) для різних відносних відстаней b/a між штампами при $\nu = 0{,}3$ і $\mu_0 = 0{,}25$, наведені у табл. 1. Із збільшенням коефіцієнта тертя μ_0 проміжок можливих значень P_0/P звужується і, наприклад, при $\mu_0 = 0{,}5$, $b/a < 0{,}342$ зовсім зникає.

Таблиця 1

b/a	0,1	0,3	0,5	0,7	0,9
$\bar{P}_0^{\min}$	0,120	0,315	0,520	0,770	1,187
$\bar{P}_0^{\max}$	0,125	0,464	1,066	2,465	9,451

Випадок відсутності довантаження

У випадку відсутності довантаження ($P_0/P = 0$) умова (17) не може бути виконаною, оскільки інтеграл, який входить в цю умову, є додатною величиною. Як у точці $x=b$, так за неперервністю функції $u_x|_{y=0}$ і у деякому околі цієї точки, зокрема, на певній частині $b \le x < b+\delta$ підобласті контакту $b \le x \le a$ проковзування відбувається у протилежному напрямку, ніж припускалося за постановкою задачі. Отже, у випадку $P_0 = 0$ поставлена задача є фізично беззмістовною, оскільки повного проковзування граничних

точок півплощини уздовж основ штампів насправді не відбувається. Розв'язок (15) при $P_0 = 0$ отримано Л. А. Галіним [1], однак фізичну суперечливість такого розв'язку ним не було виявлено.

Обговорюване тут протиріччя розв'язку задачі за відсутності довантаження показує, що в цьому випадку задачу потрібно розглядати в іншій, більш складній постановці. А саме: всередині основи кожного штампа виникають зони зчеплення $-c_2 \le x \le -c_1$, $c_1 \le x \le c_2$ ($b < c_1 < c_2 < a$), а поблизу країв – зони проковзування $-a \le x < -c_2$, $-c_1 < x \le -b$, $b \le x < c_1$, $c_2 < x \le a$, причому в зонах проковзування на кожному штампі рух граничних точок півплощини відбувається у напрямку до середини штампа. У такій постановці числове розв'язання задачі (при $P_0 = 0$) із застосуванням методу механічних квадратур отримано А. А. Амірджаняном і А. А. Саакяном [9]. Таку ж постановку задача має і при довантаженні, яке є недостатнім для забезпечення повного проковзування граничних точок півплощини уздовж основи штампів, тобто коли $0 < P_0/P < \overline{P}_0^{\min}$.

Висновок

Увівши довантаження пружної півплощини на її межі зосередженою силою у середній точці між штампами, з'ясовано величину довантаження, за якої між межею півплощини та основами штампів відбувається повне проковзування. Показано, що розв'язок задачі за відсутності довантаження, отриманий Л. А. Галіним, є фізично суперечливим.

Список використаних джерел

1. *Галин Л. А.* Контактные задачи теории упругости. – Москва: Гостехиздат, 1953. – 264 с.
2. *Уфлянд Я. С.* Интегральные преобразования в задачах теории упругости. – Ленинград: Наука, 1968. – 402 с.
3. *Ковура А. Б.* Об одном обобщении задачи Садовского // Смешанные задачи механики деформируемых сред: Сб. научн. тр. – Днепропетровск, 1995. – С. 72-79.
4. *Ковура А. Б., Рыбка В. М.* Гладкий контакт штампа с упругой полуплоскостью в условиях симметричной пригрузки // Вісник Дніпропетровського університету. Механіка. – 1998. – Вип. 1. – Т. 2. – С. 41-44.
5. *Ковура А. Б., Рыбка В. М.* О гладком контакте штампа с упругой полуплоскостью при несимметричной пригрузке // Вісник Дніпропетровського університету. Механіка. – 1999. – Вип. 2. – Т. 2. – С. 74-81.
6. *Джонсон К.* Механика контактного взаимодействия. – Москва: Мир, 1989. – 510 с.
7. *Мусхелишвили Н. И.* Сингулярные интегральные уравнения. – Москва: Наука, 1962. – 600 с.
8. *Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И.* Интегралы и ряды. – Москва: Наука, 1981. – 800 с.
9. *Амирджанян А. А., Саакян А. В.* О вдавливании пары жестких штампов, соединенных упругой балкой, в упругую полуплоскость с учетом сил трения и сцепления в зоне контакта // Сучасні проблеми механіки деформівного твердого тілі, диференціальних та інтегральних рівнянь. Тези доповідей Міжнародної наукової конференції. 23-26 серпня 2013 р. – Одеса: «Астропринт», 2013. – С. 14-15.

References

1. GALIN, L. (1953) *Kontaktnye zadachi teorii uprugosti.* Moskva: Gostehizdat.
2. UFLJAND, JA. (1968) *Integral'nye preobrazovanija v zadachah teorii uprugosti.* Leningrad: Nauka.
3. KOVURA, A. (1995) Ob odnom obobshenii zadachi Sadovskogo. *Smeshannye zadachi mehaniki deformiruemyh sred.* P. 72-79.
4. KOVURA, A. and RYBKA, V. (1998) Gladkii kontakt shtampa s uprugoi poluploskost'ju v uslovijah simmetrichnoi prigruzki. *Visnyk Dnipropetrovs'kogo universitetu.* Issue 1. V. 2.
5. KOVURA, A. and RYBKA, V. (1999) O gladkom kontakte shtampa s uprugoi poluploskost'ju v pri nesimmetrichnoi prigruzke. *Visnyk Dnipropetrovs'kogo universitetu.* Issue 2. V. 2.
6. DZHONSON, K. (1989) *Mehanika kontaktnogo vzaimodeistvija.* Moskva: Mir.
7. MUSHELISHVILI, N. (1962) *Singuljarnye integral'nye uravnenija.* Moskva: Nauka.
8. PRUDNIKOV, A., BRYCHKOV JU. and MARICHEV, O. (1981) *Integralyi i rjadyi.* Moskva: Nauka.
9. AMIRDZHANJAN A. A., SAAKJAN, A. V. (2013) O vdavlivanii pary zhestkih shtampov, soedinonnyh uprugoi balkoi, v upruguju poluploskoct' s uchetom sil trenija i stseplenija v zone kontakta. In *The Modern Problems of Solid Mechanics, Differential and Integral Equations.* Abstracts International Scientific Conference. August 23-26, 2013, Odessa. Odesa: Astroprint. pp. 14-15.

Надійшла до редколегії 19.08.14

УДК 539.3.

Т.М. Прощенко, к.ф.-м.н.

Про крайові задачі трансверсально – ізотропних пластин прикладної теорії типу Тимошенка.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова, 4д.
e-mail: t.proshchenko@gmail.com

T.M. Proshchenko, PhD.

About the boundary value problems transversely - isotropic plates of applied theory of Timoshenko type.

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d.
e-mail**:** t.proshchenko@gmail.com

Викладено спосіб зведення крайових задач згину трансверсально – ізотропних пластин прикладної теорії типу Тимошенка до задач теорії функцій комплексної змінної. Розглянуто випадки деформування пластини при різних видах граничних напружень.
Ключові слова: трансверсально – ізотропна пластина, крайові задачі.

The article presents the method of reduction of bend boundary value problems transversely - isotropic plate of applied theory of Timoshenko type to problems of theory of functions of a complex variable. It is assumed that the plate of constant thickness is under action of transverse stresses. Stress state of the plate is described by the equations of equilibrium and elasticity relations. The three types of boundary conditions defined on a curved edge plates: rigidly fixed edge; hinged edge; edge free from stress are considered. To erect of posed boundary value problems to problems of theory of functions of a complex variable are introduced complex variables and associated with them differential operators. The general solution of the equilibrium equation is represented by the real part of the sum of two random analytic functions and particular solutions of equation which are determined with particular boundary conditions.
Key Words: transversely - isotropic plate, boundary value problems.

Статтю представив Я.О. Жук, д.ф.-м.н., професор.

Вступ. Для розрахунків напружено - деформованого стану анізотропних пластин виготовлених із армованих композитних матеріалів, використовують прикладні теорії, що дозволяють врахувати деформації поперечного зсуву. Широке застосування знаходять теорія типу Тимошенко [1], Е. Рейсснера [2], С.А. Амбарцумяна [3] та ін. У [4, 5] зазначається, що до прикладних теорій можна віднести математичну теорію І.Н. Векуа в першому наближенні. В даній роботі, наслідуючи метод [4], викладено спосіб зведення крайових задач згину трансверсально - ізотропних пластин теорії типу Тимошенка до задач теорії функцій комплексної змінної.

Постановка задачі і основні співвідношення. Припустимо, що пластина постійної товщини h ($h = const$) знаходиться під дією нормованих поперечних напружень σ_{33}^{-}, σ_{33}^{+}, прикладених до лицьових граничних пластин $h_3 = \pm h/2$. Пружна рівновага пластини описується системою рівнянь [5]

$$\frac{\partial Q_1}{\partial x_1}+\frac{\partial Q_2}{\partial x_2}+p=0\,;\quad \frac{\partial M_{11}}{\partial x_1}+\frac{\partial M_{12}}{\partial x_2}-Q_1=0\,;$$
$$\frac{\partial M_{12}}{\partial x_1}+\frac{\partial M_{22}}{\partial x_2}-Q_2=0\,, \qquad (1)$$

де $M_{\alpha\beta}$ $(\alpha\beta = 1,2)$ – згинаючі та скручуючий моменти, Q_α $(\alpha = 1,2)$ – перерізуючі сили, $p = \sigma_{33}^{+} - \sigma_{33}^{-}$. Співвідношення пружності, що зв'язують зусилля і моменти з прогином серединної площини w і кутами повороту нормалі ϑ_1 і ϑ_2, визначаються рівностями [6]

$$M_{11}=D\left(\frac{\partial \vartheta_1}{\partial x_1}+\nu\frac{\partial \vartheta_2}{\partial x_2}\right);\ M_{22}=D\left(\nu\frac{\partial \vartheta_1}{\partial x_1}+\frac{\partial \vartheta_2}{\partial x_2}\right);$$
$$M_{12}=\frac{(1-\nu)D}{2}\left(\frac{\partial \vartheta_1}{\partial x_2}+\frac{\partial \vartheta_2}{\partial x_1}\right)=0\,;$$
$$Q_\alpha=\frac{Eh}{a}\left(\frac{\partial w}{\partial x_\alpha}+\vartheta_\alpha\right);\ (\alpha=1,2)\,, \qquad (2)$$

© Т.М. Прощенко, 2014

в яких $a = E/k^2G'$, $D = Eh^3/12(1-\nu^2)$ – циліндрична жорсткість, E - модуль пружності, G' - поперечний модуль зсуву, ν - коефіцієнт Пуассона, k^2 - коефіцієнт зсуву. Згідно (2), рівняння рівноваги (1) набудуть вигляду

$$\Delta w + \theta + \frac{a}{Eh}p = 0;$$
$$\Delta\vartheta_\alpha + \frac{1+\nu}{1-\nu}\frac{\partial\theta}{\partial x_\alpha} - \frac{\lambda}{h^2}\left(\frac{\partial w}{\partial x_\alpha} + \vartheta_\alpha\right) = 0 \ \ (\alpha = 1,2), \quad (3)$$

де $\theta = \partial\vartheta_1/\partial x_1 + \partial\vartheta_2/\partial x_2$.

Якщо ввести функцію ω згідно формул

$$\vartheta_\alpha = -\frac{\partial w}{\partial x_\alpha} - \mu h^2\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(\Delta w + \frac{a}{Eh}p\right) - (-1)^\alpha\frac{\partial\omega}{\partial x_\beta}$$
$$(\alpha,\beta = 1,2;\ \alpha \neq \beta), \quad (4)$$

то система (3) зведеться до таких рівнянь

$$\Delta\Delta w = \frac{1}{D}\left(p - \mu h^2\Delta p\right)\ \Delta\Delta w = \frac{1}{D}\left(p - \mu h^2\Delta p\right), \quad (5)$$
$$\Delta\omega - \frac{\lambda}{h^2}\omega = 0. \quad (6)$$

Тут $\mu = \frac{aD}{Eh^3} = \frac{D}{k^2G'h^3}$, $\lambda = \frac{2k^2G'h^3}{(1-\nu)D}$.

Вважатимемо край пластини криволінійним з нормаллю n і дугою s. Розглянемо найбільш вживані граничні умови на краю пластини:

а) жорстко закріпленого краю

$$w = 0; \quad \vartheta_n = 0; \quad \vartheta_s = 0, \quad (7)$$

де ϑ_n, ϑ_s – кути повороту нормалі;

в) шарнірно опертого

$$w = 0; \quad M_n = 0; \quad M_{ns} = 0, \quad (8)$$

і с) вільного від напружень

$$Q_n = 0; \quad M_n = 0; \quad M_{ns} = 0. \quad (9)$$

Метод зведення крайових задач до задач теорії функцій комплексної змінної. Вводимо змінні $z = x_1 + ix_2$, $\overline{z} = x_1 - ix_2$ і пов'язані з ними диференціальні оператори $2\partial_{\overline{z}} = \partial/\partial x_1 + i\,\partial/\partial x_2$, $2\partial_z = \partial/\partial x_1 - i\,\partial/\partial x_2$. Помножимо друге ($\alpha = 2$) рівняння (4) на i та складемо з першим ($\alpha = 1$):

$$\vartheta_+ = \vartheta_1 + i\vartheta_2 = -2\partial_{\overline{z}}\left[w + \mu h^2\left(\Delta w + ap/Eh\right) + i\omega\right]. \quad (10)$$

Застосуємо до функції ϑ_+ із (10) операцію ∂_z і у знайденій рівності розглянемо дійсну частину. Врахувавши рівняння (5), отримаємо значення $\theta = -(\Delta w + ap/Eh)$, що узгоджуються з формулою (3).

Співвідношення пружності (2) у комплексній формі записуються таким чином

$$Q_+ = \frac{Eh}{a}\left(2\partial_{\overline{z}}w + \vartheta_+\right); \quad M_{11} + M_{22} = (1+\nu)D\theta;$$
$$M_{11} - M_{22} + 2iM_{12} = 2(1-\nu)D\partial_{\overline{z}}\vartheta_+. \quad (11)$$

Представимо розв'язок рівняння (5) у вигляді

$$w = 2\,\mathrm{Re}\,\overline{z}\left[\phi(z) + \chi(z)\right] + w_0, \quad (12)$$

де $\phi(z)$, $\chi(z)$ – довільні аналітичні функції, w_0 - частинний розв'язок неоднорідного рівняння. Згідно з (12) визначаємо функції кутів повороту

$$\theta = -4\left[\phi'(z) + \overline{\phi'(z)}\right] - \left(\Delta w_0 + ap/Eh\right);$$
$$\vartheta_+ = -2\left[\phi(z) + z\overline{\phi'(z)} + 4\mu h^2\overline{\phi''(z)} + \overline{\chi'(z)} + i\partial_{\overline{z}}\omega\right] -$$
$$-2\partial_{\overline{z}}\left[w_0 + \mu h^2\left(\Delta w_0 + ap/Eh\right)\right]. \quad (13)$$

Враховуючи (13), рівності (11) набудуть вигляду

$$Q_+ = -\frac{2Eh}{a}\left(i\partial_{\overline{z}}\omega + \nu_1^* h^2\overline{\phi''(z)}\right) - 2D\partial_{\overline{z}}\tilde{w}_0;$$
$$M_{11} + M_{22} = -4(1+\nu)D\left[\phi'(z) + \overline{\phi'(z)}\right] -$$
$$-(1+\nu)D\tilde{w}_0; \quad M_{11} - M_{22} + 2iM_{12} =$$
$$= -4(1-\nu)D\left[z\overline{\phi''(z)} + \nu_1^* h^2\overline{\phi'''(z)} + \overline{\chi'(z)} + i\partial_{\overline{z}}^2\omega\right] -$$
$$-4(1-\nu)D\partial_{\overline{z}}^2\left[w_0 + \mu h^2\tilde{w}_0\right], \quad (14)$$

де $\nu_1^* = 4\mu$, $\tilde{w}_0 = \Delta w_0 + ap/Eh$.

На границі L області S перерізуюча сила і моменти визначаються формулами

$$Q_n = -\mathrm{Im}\left(Q_+\frac{\partial\overline{z}}{\partial s}\right); \quad M_n + iM_{ns} =$$
$$= \frac{1}{2}\left[M_{11} + M_{22} - (M_{11} - M_{22} + 2iM_{12})\left(\frac{\partial\overline{z}}{\partial s}\right)^2\right]. \quad (15)$$

Враховуючи (14), матимемо

$$Q_n = \frac{Eh}{a}\frac{\partial}{\partial s}\left\{\omega + i\nu_1^* h^2\left[\phi'(z) - \overline{\phi'(z)}\right]\right\} - Q_n^{(0)}; \quad (16)$$
$$M_n + iM_{ns} = 2(1-\nu)D\left\{-\nu^*\left[\phi'(z) + \overline{\phi'(z)}\right] +\right.$$

$$+\left[z\phi''(z)+\nu_1^* h^2\overline{\phi'''(z)}+\overline{\chi''(z)}+i\frac{\partial^2\omega}{\partial\bar z^2}\right]\left(\frac{\partial\bar z}{\partial s}\right)^2\Bigg\}+$$

$$+2(1-\nu)D\left(M_n^{(0)}+iM_{ns}^{(0)}\right). \quad (17)$$

Тут $\nu^*=(1+\nu)/(1-\nu)$; $Q_n^{(0)}=D\frac{\partial\tilde w_0}{\partial n}$;

$$M_n^{(0)}+iM_{ns}^{(0)}=-\frac{\nu^*}{4}\Delta\tilde w_0+\frac{\partial^2}{\partial\bar z^2}\left[w_0+\mu h^2\tilde w_0\right]\left(\frac{\partial\bar z}{\partial s}\right)^2.$$

У випадку а) задача зводиться до знаходження голоморфних функцій $\phi(z)$, $\chi(z)$ і дійсного розв'язку рівняння (6) при умовах

$$\bar z\phi(z)+z\overline{\phi(z)}+\chi(z)+\overline{\chi(z)}=-w_0;$$

$$\phi(z)+z\overline{\phi'(z)}+\nu_1^* h^2\overline{\phi''(z)}+\overline{\chi'(z)}+i\partial_{\bar z}\omega=$$

$$=-i\left(\vartheta_n^{(0)}+i\vartheta_s^{(0)}\right)\frac{\partial z}{\partial s}, \quad (18)$$

де $\vartheta_n^{(0)}$, $\vartheta_s^{(0)}$ - -кути повороту нормалі.

Для шарнірно опертого краю дані функції визначаються із граничних умов

$$\bar z\phi(z)+z\overline{\phi(z)}+\chi(z)+\overline{\chi(z)}=-w_0;$$

$$-\nu^*\left[\phi'(z)+\overline{\phi'(z)}\right]+\left[z\overline{\phi''(z)}+\nu_1^* h^2\overline{\phi'''(z)}+\right.$$

$$\left.+\overline{\chi''(z)}+i\partial_{\bar z}^2\omega\right]\left(\frac{\partial z}{\partial s}\right)^2=-\left(M_n^{(0)}+iM_{ns}^{(0)}\right). \quad (19)$$

Прирівнюючи до нуля праві частини рівностей (16) і (17), отримаємо умови для задачі з вільним від напружень краєм пластини. Цим умовам можна надати іншого вигляду, якщо розглянути значення головного вектора Z_n і головного моменту X_n+iY_n всіх сил згідно формул

$$Z_n=\int_L Q_n ds;$$

$$X_n+iY_n=-i\int_L zQ_n ds+\int_L\left(M_n+iM_{ns}\right)dz.$$

Враховуючи (16) і (17), після деяких перетворень отримуємо такі умови

$$\varkappa^*\phi(z)+z\overline{\phi'(z)}+\nu_1^* h^2\overline{\phi''(z)}+$$

$$+\overline{\chi'(z)}+i\partial_{\bar z}\omega=f(z)+c;$$

$$\omega+i\nu_1^* h^2\left[\phi'(z)-\overline{\phi'(z)}\right]=f_3(z)+c_3, \quad (20)$$

де $\varkappa^*=-(3+\nu)/(1-\nu)$; $f(z)$, $f_3(z)$ – задані значення функцій; c, c_3 – константи.

Список використаних джерел

1. *Naghdi P.M.* Foundation of elastic shell / P.M. Naghdi // Quarterly of Applied Mathematics. – 1957. – v. 14, № 4 – P. 369 – 380.
2. *Reissner E.* On transverse bending of plates, including the effects of the stress state of a transverse shear deformation / E. Reissner // International Journal of Solids and Structures. – 1975. – v. 11. – P. 569 – 573.
3. *Амбарцумян С.А.* Терия анизотропных пластин / С.А. Амбарцумян. – Москва: Наука, 1967. – 266 с.
4. *Хома И.Ю.* О сведении краевых задач изгиба трансверсально – изотропных пластин к задачам теории функций комплексного переменного / И.Ю. Хома // Теореическая и прикладная механика. – 2009. – Вып. 46. – С. 14 – 18.
5. *Khoma I.Yu.* Representation of the solution of the equilibrium equations for a nonthin transversely isotropic plate / I.Yu. Khoma // Journal of Mathematical Sciences – 2000. – 101, № 6. – P. 3577 – 3584.
6. *Морозов Н.Ф.* Избранные двумерные задачи теории упругости / *Н.Ф. Морозов.* – Ленинград: Издательство Ленинградского университета, 1978. – 182 с.

References

1. NAGHDI, P. (1957) Foundation of elastic shell. *Quarterly of Applied Mathematics*. 14 (4). p. 369 – 380.
2. REISSNER, E. (1975) On transverse bending of plates, including the effects of the stress state of a transverse shear deformation. *International Journal of Solids and Structures.* 11. p. 569 – 573.
3. AMBARTSYMIAN, S. (1967) *Teoriia anizotropnyukh plastin.* Moskva: Nauka.
4. KHOMA, I. (2009) O svedenii krayevyukh zadach izhiba transversalno – izotropnyukh plastin k zadacham teorii funktsii kompleksnoho peremennoho. *Teoreticheskaia i prikladnaia mekhanika.* 1 (46). c. 14 – 18.
5. KHOMA, I. (2000) Representation of the solution of the equilibrium equations for a nonthin transversely isotropic plate. Journal of Mathematical Sciences. 101 (6). p. 3577 – 3584.
6. MOROZOV, N. (1978) *Izbrannyie dvymernyie zadachi teorii uprugosti*. Leningrad: Izdatelstvo Leningradskogo universiteta.

Надійшла до редколегії 28.08.2014

УДК 539.595

Ткаченко Р.В.[1], аспірант
Лимарченко О.С.[1], д.т.н., проф.

Коливання вільної поверхні рідини в резервуарі на рухомій платформі при вібраційному навантаженні

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр.-т Глушкова 4е, e-mail: terri_v@mail.ru, olelim2000@yahoo.com

Tkachenko R.[1], graduate student
Limarchenko O.S.[1], doctor of eng., professor

Oscillation of a free surface of liquid in reservoir on moving platform under vibration loading

[1 2]Taras Shevchenko Kiev National University, 03680, Kyiv, Glushkov ave., 4e, e-mail: terri_v@mail.ru, olelim2000@yahoo.com

Досліджується сумісний рух циліндричного резервуару, частково заповненого ідеальною нестисливою рідиною з вільною поверхнею, приєднаного пружиною до рухомої платформи. Вивчаються нелінійні коливання системи під дією прикладеної до рухомої платформи гармонічної сили.
Ключові слова: резервуар, рідина з вільною поверхнею, рухома платформа.

Combined motion of a rigid cylindrical reservoir, partially filled by liquid with a free surface, attached by spring to movable platform is under consideration. Mathematical model of the system is based on representation of free surfaced liquid motion in the form of decomposition with respect to normal modes of oscillations. We investigate combined motion of the system "liquid–reservoir–platform". Nonlinear oscillations of the system under harmonic external force applied to the platform were studied. It was ascertained that for different stiffness of springs behavior of liquid can vary considerably. In law of liquid oscillations modulation dominates, steady modes of oscillations do not manifest practically. Numerical simulation was done for frequencies of external excitation in three ranges, namely, for frequencies lower and greater than the resonant frequency of liquid oscillations with respect to the first normal mode and in close vicinity of this frequency. Peculiarities of behavior of the system for all three frequency ranges were studied.
Key Words: rigid cylindrical reservoir, liquid with a free surface, movable platform.

Статтю представив доктор фіз.-мат. наук, професор Жук Я.О.

Вступ

В сучасній техніці широко використовуються резервуари з рідиною, які знаходяться на рухомих платформах при різних способах закріплення [1, 3]. Такі системи описуються моделями у вигляді нестаціонарних нелінійних рівнянь. На сучасному етапі для розв'язку таких задач використовуються наближені методи, переважно основані на варіаційних алгоритмах.

Метою роботи є вивчення коливного руху рідини і резервуару при пружинному закріпленні резервуара до рухомої платформи під дією гармонічного збудження.

Об'єкт дослідження і постановка задачі

Досліджується горизонтальний рух абсолютно твердого циліндричного резервуара, частково заповненого ідеальною рідиною, приєднаного пружиною до рухомої рами (для порівняння розглядалось також жорстке закріплення) під дією сили, що змінюється за гармонічним законом. В початковий момент часу система платформа – резервуар з рідиною знаходиться у стані спокою. Розглядається поведінка системи при різних жорсткостей закріплення і частотах силового збудження.

Математична модель нелінійної динаміки сумісного руху резервуару з рідиною при пружному закріпленні на рухомій платформі побудована в роботі [1] на основі методів роботи [2]. Після переходу до дискретної моделі відносно амплітудних параметрів коливань рідини a_k, параметрів поступального руху платформи ε_k і деформації пружини u_k маємо систему звичайних диференціальних рівнянь, яка в загальному вигляді має форму

$$\sum_{n=1}^{N} p_{rn}(a_k,t)\ddot{a}_n + \sum_{n=N+1}^{N+3} p_{rn}(a_k,t)\ddot{\varepsilon}_{n-N} + \\ + \sum_{n=N+4}^{N+6} p_{rn}(a_k,t)\ddot{u}_{n-N-3} = q_r(a_k,\dot{a}_l,t), r=\overline{1,N+6}.$$

Модель описує сумісний рух компонент системи.

Результати моделювання

© Р.В.Ткаченко, О.С.Лимарченко 2014

Для розрахунків приймалася модель, яка включає 12 форм коливань [1]. Для мас рідини, резервуару, платформи прийнято M_{res}=0,25 M_l, M_{fr}=5 M_l. Розглядалися жорсткості пружини c=50000 Н/м, 100000 Н/м, 200000 Н/м 500000 Н/м, 2000000 Н/м. На платформу діє сила такого типу $F = A\cos(\omega t)$, де $\omega = 3.0$; 3.5; 3.8; 4.0; 4.1; 4.13; 4.14; 4.147; 4.157; 4.2; 4.25; 4.3; 4.5; 4.8; 5.2; 5.5. Поведінка системи розглядалася на інтервалі до $t = 125$ с, що відповідає приблизно 80 періодів коливань за першою формою. Розглядаємо коливання системи в околі резонансної частоти по першій формі (для резервуару радіуса 1 м і глибини заповнення 1 м ω=4,143368).

Амплітуди зміни вібрацій підбиралися таким чином, щоб коливання рідини потрапляли в зону нелінійного діапазону збурень на вільній поверхні (від 210 Н до 20000 Н). При коливаннях вільної поверхні рідини перевірялося виконання основних властивостей нелінійного хвилеутворення (висота горба хвилі більші глибини впадини, відсутність вузлових ліній, відсутність виходу на режим усталених коливань [3],.тощо),.

Проаналізуємо характер зміни збурень вільної поверхні ξ/R в дорезонансній, резонансній і зарезонансній області по відношенню до частоти першої гармоніки ψ_1. Однією із характерних особливостей нелінійних коливань є модуляція без дрейфу середнього значення. Це характерно для областей віддалених від резонансної зони, наприклад для $\omega = 3.0$ і менших жорсткостей.

На Рис. 1 приведено коливання вільної поверхні рідини при $\omega = 3.0$, c=100000 Н/м, А=7647. Помітна модуляція без дрейфу середнього значення, причому максимальне значення амплітуди ξ/R буде 0,3005. При більших значеннях жорсткостей і при відсутності пружини присутня модуляція, з незначним зсувом середнього значення в додатному напрямку. При наближені до резонансної зони, як до резонансу так і після ($\omega = 3.5$; 3.8; 4.0; 4.2; 4.3; 4.5), для всіх жорсткостей пружини маємо модуляцію, період якої змінюється зі зміною жорсткості пружини. Середнє значення зсунуто в додатній бік, гребінь хвилі більше глибини впадини, вихід на усталений режим не спостерігається, що узгоджується з даними експериментів. Однак існує вихід на упорядкований режим в дорезонансній зоні при $\omega = 3.8$, А=210 Н, c=100000 Н/м і ω=4.0, А=662 Н; c=200000 Н/м, в зарезонансній зоні при ω=4.2, А=520 Н, c=2000000 Н/м і при тих же параметрах для ω і А при жорсткому закріпленні.

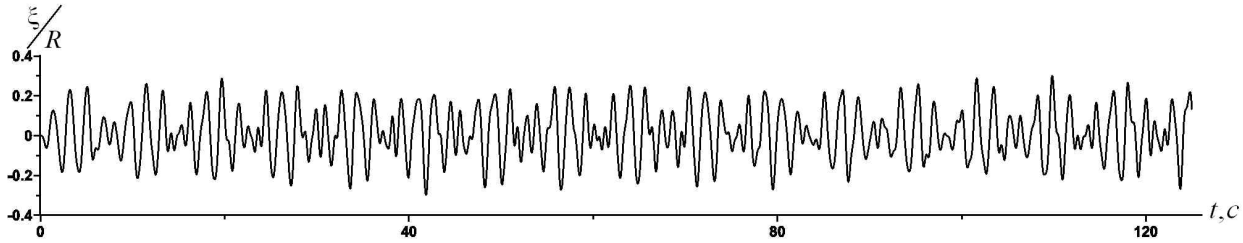


Рис 1. Коливання вільної поверхні рідини при $\omega = 3.0$ c=100000 Н/м, А=7647

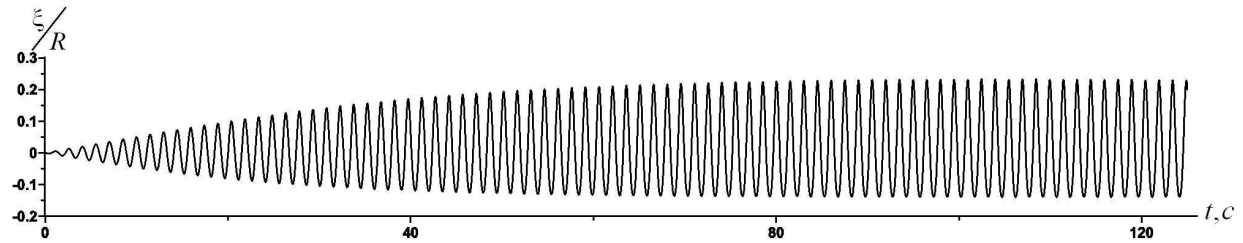


Рис. 2. Коливання вільної поверхні рідини при $\omega = 4.2$, c=200000Н/м, А=520Н

На Рис. 2 приведено коливання вільної поверхні рідини при $\omega = 4.2$, С=2000000 Н/м, А=520 Н, що вказує на вихід на упорядкований режим руху. Тут максимальні значення амплітуд ξ/R досягаються в околі мінімальних значень амплітуд зовнішніх сил при всіх вказаних жорсткостях. Режим близький до упорядкованого, з ледь помітною модуляцією відбувається в околі резонансу при $\omega = 4.13$; 4.14; 4.147; 4.157, і с=500000 Н/м.

На Рис. 3 приведено коливання в часі вільної поверхні рідини при $\omega = 4.14$, С=5000000 Н/м,

A=535 Н (80 періодів коливань). Амплітуда ξ/R до 35 періоду зростає до максимальної, 5 періодів тримається на одному рівні, потім дуже повільно спадає до 50 періоду, а далі знову зростає. Відмітимо також, що в цих випадках максимальні амплітуди ξ/R спостерігаються при менших значеннях амплітуд зовнішніх сил (605 Н, 535 Н, 400 Н, 470 Н, 381 Н). При інших значеннях жорсткостей і частот зовнішніх сил максимальні значення ξ/R досягаються при суттєво більших значеннях амплітуд коливань зовнішніх сил. Середні значення при коливаннях ξ/R зсунуті в додатному напрямку, горби хвиль вищі впадин.

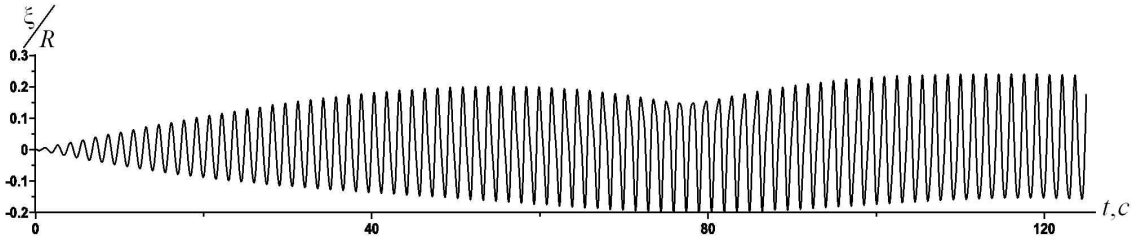


Рис 3. Коливання вільної поверхні рідини при $\omega = 4.14$, c=5000000 Н/м, A=535 Н

Відмітимо ще одну з характерних властивостей нелінійних коливань – антирезонанс. Присутні коливання з модуляцією, де є невеликі зони, в яких коливання відбуваються в околі нуля, і амплітуди їх суттєво менші максимальних протягом декількох періодів коливань.

На Рис. 4 приведено коливання вільної поверхні рідини при $\omega = 4.3$, C=500000 Н/м, A=1480 Н характерні для антирезонансу. Тут через кожні 10 періодів відбувається 3-5 коливань з амплітудою приблизно в 10 раз меншою максимальної (0,2981), середнє значення більше зсунуте в додатному напрямку (горби хвилі в 1.6 рази більші за глибини впадин), що якісно узгоджується з експериментом.

Для нелінійних коливань також характерним є суттєвий вплив вищих гармонік. Найяскравіше це спостерігається при $\omega = 4.8, 5.2, 5.5$.

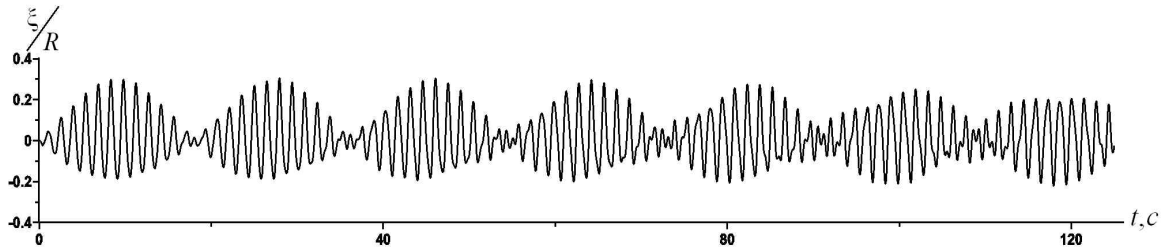


Рис 4.Коливання вільної поверхні рідини при $\omega = 4.3$, c=500000 Н/м, A=1480 Н

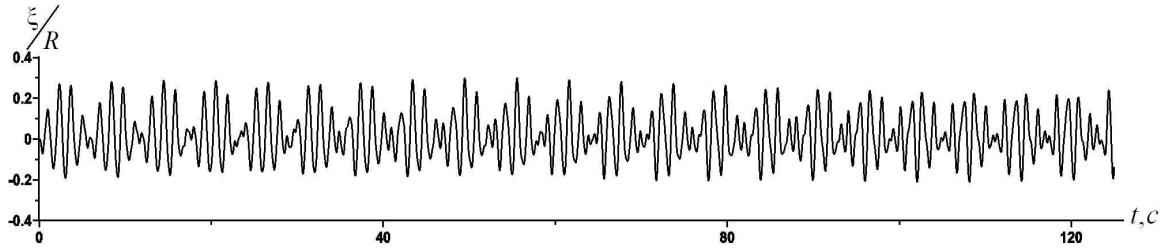


Рис 5. Коливання вільної поверхні рідини при $\omega = 5.2$, c=5000000 Н/м, A=14900 Н.

На Рис. 5 наведені коливання вільної поверхні рідини при $\omega = 4.3$, c=5000000 Н/м, A=1480 Н з найбільш суттєвим впливом вищих гармонік. Це пояснюється наближенням до другої резонансної частоти по ψ_1.

Якщо розглядати збурення вільної поверхні на стінці циліндра в точках перпендикулярних до напрямку дії зовнішньої сили, то тут також проявляються основні характеристики нелінійних коливань але з меншими амплітудами.

На Рис. 6 приведено коливання вільної поверхні рідини на стінці циліндра в точках терпендикулярних до напрямку дії зовнішньої сили, при $\omega = 4.14$, c=500000 Н/м, A=535 Н. Вихід на коливальнбий режим відбувається з суттєвим запізненням, що обумовлене потребою часу на роз-

винення нелінійних механізмів коливань. В околі резонансу найбільші амплітуди коливань і періоди модуляції більші ніж в дорезонансному і зарезонансному діапазонах.

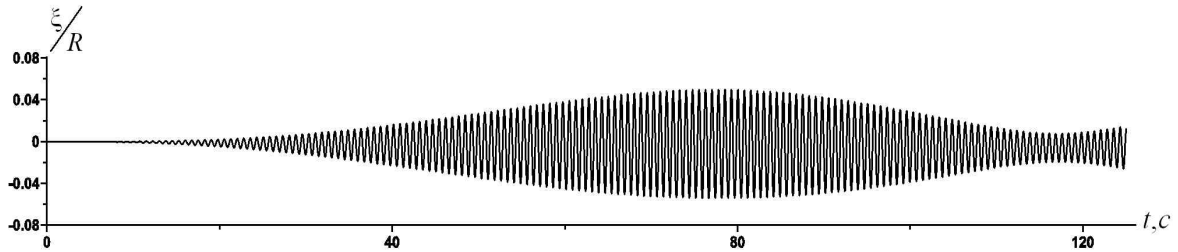


Рис 6. Коливання вільної поверхні рідини на стінці циліндра в точках перпендикулярних до напрямку дії зовнішньої сили, при $\omega = 4.14$, c=500000 Н/м, A=535 Н.

Отже в дорезонансних областях і при. ω=4.3 без пружини для ε_x/R відбувається повтор характеру руху ξ/R але з меншими амплітудами. При відсутності пружини рух зміщено в додатню область. Відмінним є рух в резонансному випадку ω=4.14, де при безпружинному закріпленні коливання відбуваються повністю в додатній області з виходом на упорядкований режим.

Висновки

Досліджено задачу про сумісний рух системи «резервуар–рідина–платформа» при пружному закріпленні резервуара. Для різних жорсткостей і частот силового збудження руху платформи проаналізовано зміну в часі збурень на вільній поверхні, параметрів поступального руху резервуара і платформи. Моделювання свідчить, що пружне закріплення в більшості випадків приводить до збільшення амплітуд коливань вільної поверхні за виключенням невеликої зони в околі частоти $\omega = 4.3$, де пружина зменшує ці ампулітуди тим більше, чим менше жорсткість пружини. Тобто використання пружини як засобу зменшення коливань рідини на рухомій платформі недоречне.

Встановлено, що при коливаннях вільної поверхні рідини суттєво проявляються нелінійні ефекти: модуляція коливань, дрейф середнього значення, антирезонанс, вплив вищих гармонік. Наявність пружини в більшості підсилює ці ефекти, за виключенням малої зони в околі $\omega = 4.3$.

Показано, що вихід системи на усталений режим не спостерігається, але при $\omega = 3.8$, A=210 Н, c=100000 Н/м; ω=4.0, A=662 Н, c=200000 Н/м в дорезонансному діапазоні; при ω=4.2, A=520 Н, c=2000000 Н/м в зарезонансній зоні і при тих же параметрах для ω і A при жорсткому закріплені спостерігається вихід на упорядкований режим близький до усталеного.

Список використаних джерел

1. *Лимарченко О.С.* Влияние пружинного закрепления на динамику цилиндрического резервуара с жидкостью, находящегося на подвижной платформе / О.С. Лимарченко, Р.В. Ткаченко // Прикл. механика, 2014. – **50**. – №3. – С. 93-96.
2. *Limarchenko O.* Nonlinear properties for dynamic behavior of liquid with a free surface in a rigid moving tank / O. Limarchenko // Int. J. Nonlinear Sci. and Numer. Simul. – 2000. – **1**. – № 1. – P. 105–118.
3. *Pal P.* Sloshing of liquid in partially filled container – an experimental study / P. Pal // International Journal of Recent Trends in Engineering. – 2009. – **1**, №. 6, P. 1–5.

References

1. LIMARCHENKO O.S. and TKACHENKO R.V. (2014) Vliyanie pruzhinnogo zakrepleniya na dinamiku tsilindricheskogo rezervuara s zhidkostyu, nakhodyashchegosya na podvizhnoi platform. In International Applied Mechanics, **50**, № 3, pp. 93-96.
2. LIMARCHENKO O. (2000) Nonlinear properties for dynamic behavior of liquid with a free surface in a rigid moving tank. *In Int. J. Nonlinear Sci. and Numer. Simul.,* **1**, № 1, pp. 105–118.
3. PAL P. (2009) Sloshing of liquid in partially filled container – an experimental study. In *International Journal of Recent Trends in Engineering,*.**1**, No. 6, pp. 1–5

Надійшла до редколегії 11.09.2014

КОМП’ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 681.51

Адамчук-Чала Н.І.[1], к.б.н.,докторант
Яценко В.О.[2], д.т.н., проф..
Гніденко В.В.[3], аспірант
Пашенковська І.С.[2], аспірант

Рослини в космосі: виміри, моделювання та експерименти

[1] Інститут мікробіології та вірусології ім. Д.К. Заболотного НАН України, 03680, м. Київ, вул. Академіка Заболотного, 154,
e-mail: m_nv@mail.ru
[2] Київський національний університет імені Тараса Шевченко, 03680, пр. Глушкова 4д,
e-mail: vyatsenko@gmail.com
[3] Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут», 03056, м. Київ, проспект Перемоги 37,
e-mail: vanhealsing@yandex.ru

Adamchuk-Chala N.I.[1], PhD, doctoral candidate
Yatsenko V.O.[2], doctor of scinces, prof.
Gnidenko V.V.[3], graduate student
Pashenkovska I.S[2], graduate student

Plants in space: measurements, modeling and experiments

[1] D.K. Zabolotny Institute of Microbiology and Virology of the NASU, 03680, Kyiv, Acad. Zabolotny str., 154,
e-mail: m_nv@mail.ru
[2] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Prospect Glushkova 4d,
e-mail: vyatsenko@gmail.com
[3] National Technical University of Ukraine “Kyiv Polytechnic Institute”, 03056, Kyiv, Prospect Peremogy 37,
e-mail: vanhealsing@yandex.ru

Проведено аналіз результатів сучасних досліджень поведінки рослин в умовах мікрогравітації. Описано деякі з перспективних інформаційних технологій дослідження мікробіоценозів та представлені результати експериментальних вимірювань. Представлено положення, що архітектура кореневих, прикореневих і позакореневих субстратних мікроценозів може бути інформативним показником впливу факторів космічного польоту на рослинно-мікробну систему. Розглянуто методику, яка дозволяє працювати з будь-якими рослинами, використовуючи різні можливості вивчення та порівняння способів організації мікробіоценозу в корінні рослин і біля них, як в умовах Землі, так і в космічних польотах.

Ключові слова: аналіз, вимірювання, моделювання, оптимізація, класифікація.

An analysis of modern results of vegetation dynamics under microgravity conditions has been conducted. Some promising information technologies for microbiocenoses researches and experimental measurement results have been presented. Submitted provisions of root architecture, basal and foliar substrate microcenosis could be informative indicator of the space flight factors impact on plant-microbial system. The method which allows you to work with any plants using a variety of opportunities to study and compare the ways of the indigenous microbiota in plants and around them, as on the Earth and on space flights is considered. New technology was used to identify the dynamics of formation substrate microbiota, bacterial and fungal found associations and contacts between them were identified. Controlled nonlinear lattice imaging has been developed. A method using support vector machines for pattern recognition and image classification microbiocenosis based on validation procedure has been proposed. The resulting material is informative, intuitive and can be widely used in laboratory and in field conditions on the Earth.

Key Words: analysis, measuring, modeling, optimization, classification.

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

1. Вступ

В умовах природних мікробіоценозів мікроорганізми здобувають системно-просторову організацію у вигляді архітектури мікроекосистем, здатних до автономного існування [1].

Спроби з’ясувати справжній стан мікробіоценозів відбувались неодноразово [6]. Наявні сьогодні уявлення про мікробіоценози обмежені можливостями стандартних методів, до яких насамперед варто віднести пряму мікроскопію не усереднених зразків, які обережно витягнуті із субстрату корінців, біоплівок, ділянок листків і т. д,

© Н.І. Адамчук-Чала, В.О. Яценко, В.В. Гніденко, 2014

однак через непрозорість більшості субстратів її можливості аналізу обмежені, що в свою чергу обмежує доступність їхнього дослідження.

Особливе значення може мати архітектура мікробіоценозів, що формується в штучно створюваних системах – від посівів культурних рослин у польових умовах до їхнього культивування в контейнерах приладів росту рослин при мікрогравітації. Це головним чином зумовлене тим, що корінь рослин є центральним й значною мірою формуючим компонентом мікробіоценозів [3], особливо при становленні ризосферних мікробіоценозів рослин, які культивуються на штучних субстратах.

2. Експерименти з рослинами в космосі

Відомо, що під впливом умов реального космічного польоту істотно змінюються практично всі сторони життєдіяльності рослин – ростові, морфологічні, фізіологічні, біохімічні [5, 7, 8].

У ході біоекспериментів, проведених на космічних станціях «Салют» та «Мир», показано, що в умовах тривалого космічного польоту, мікробіота набуває більшої агресивності відносно рослини-господаря [2]. Підвищення агресивності мікроорганізмів щодо рослини була виявлена під час експерименту на борту космічного корабля «Союз» з водною папороттю Азола в приладі «ИФС – 2». У дослідженнях, проведених на космічній станції «Салют – 6» з *Azolla pinnata*, було вперше продемонстровано, що умови мікрогравітації викликають зміни не лише рослини, але й мікросимбіонта [8, 9].

Ультраструктура синьо-зеленої азотофіксуючої водорості *Anabaena azollae*, що є прокаріотичним симбіонтом водної папороті *Azolla pinnata*, детально описана після 8-денного космічного польоту [8]. Ця водорость росте в закритих порожнинах листків. Матеріал був фіксований на орбіті для електронно-мікроскопічних досліджень. За формою й ультраструктурною організацією клітин експериментальної і контрольної популяції були подібні. Розширені тилакоїди були виявлені у незначної кількості клітин. Спостерігалися поодинокі випадки утворення хвилястих або вигнутих клітинних стінок, які формувалися під час поділу клітин. Електронна щільність цитоплазми клітин, що розвивалися в умовах дії зміни сили тяжіння, була значно нижче, ніж у контролі [9].

В умовах космічного польоту технології вирощування рослин значною мірою відрізняються від використовуваних в наземних умовах. Під час космічного польоту штучний субстрат і коріння рослин обростатимуть мікроорганізмами із формуванням абсолютно невідомої архітектури, що впливатиме на ріст і розвиток рослин. За таких умов можливе виникнення складних перебудов у структурно-функціональній організації мікробіоценозів, які не піддаються прогнозу та відображають як зміни в фенотипі в рамках початкових існуючих генетичних програм, так і в генетиці, які виникають під дією факторів космічного польоту[11]. Авторами на прикладі вивчення спор (*Bacillus subtilis*) в 35-денному польоті станції «Мир» показано дворазове збільшення мутації за маркером, який досліджувався, хоча станція «Мир» перебувала на низькій орбіті, нижче радіаційних поясів Землі, де від випромінювання значною мірою захищає магнітосфера. Оскільки міжнародна космічна станція перебуває вище радіаційних поясів Землі, на ній можна чекати більш високий рівень мутагенезу, що може призвести до прискореної деградації біоматеріалу культиваційних камер рослин.

В субстраті культиваційних камер слід чекати збільшення активності біологічних процесів [10]. Перший етап таких змін можна чекати на рівні просторової структури кореневих, прикореневих і позакореневих субстратних мікробіоценозів, архітектура яких може бути дуже інформативним показником впливу факторів космічного польоту на екосистему, що формується на поверхні та навколо вищих рослин.

3. Технологія дослідження рослин

Для дослідження мікробіоценозів за умов мікрогравітації [4] необхідна відповідна технологія. В роботі [3] була запропонована нова технологія, яка не руйнує мікробні спільноти і сприяє вивченню біологічних організмів в усьому діапазоні техніки мікроскопії – від мікро- до нанорівня організації живого. Підготовлені для роботи лавсанові пластинки необхідного розміру містяться в субстраті на різній відстані від висіяного інокульованого насіння рослини. Через певний час після початку росту рослини пластинки по черзі вилучаються із субстрату, так щоб не порушувати архітектуру мікробіоценозу, який сформований на поверхні обростання

корінцями й мікроорганізмами, фіксуються та досліджуються. Оскільки пластинки вироблені із прозорого органічного матеріалу, спільноту мікроорганізмів, яка на них виросла, можна досліджувати як у світлооптичному мікроскопі, так й в електронному мікроскопі.

Таку технологію в силу своєї простоти й доступності легко застосовувати при складанні освітніх програм. Спостереження у світлооптичному мікроскопі можливі майже в будь-якій школі, а при вдалому співробітництві шкіл та університетів, також і в електронному мікроскопі. У поєднанні з сучасними комп'ютерними можливостями пропонована технологія проста у своїй реалізації, а одержуваний матеріал інформативний, наочний і може бути широко використаний у лабораторних і польових умовах на Землі.

Контури зі зворотним зв'язком, що управляють багатополярними магнітними лінзами для зменшення аберацій та інших дефектів зображення, програмувальні вузли позиціювання зразків, а також продуктивні інтерфейси для зв'язку з комп'ютерами і системами зберігання даних – все це лише вершина айсберга цифрової електроніки, яка задіяна в сучасних трансмісійних електронних мікроскопах (ТЕМ).

Донедавна результати роботи ТЕМ фіксувалися винятково за допомогою високочутливих фотоплівок (які доводилося проявляти й сканувати для подальшої комп'ютерної обробки). Сьогодні усе більше досліджень ведеться з використанням CCD-матриць, ключові переваги яких – оперативність та зручність. Плата за комфорт велика: вартість ТЕМ-сумісних 64-мегапіксельних CCD-фотоелементів обчислюється сотнями тисяч доларів. Сьогодні дослідження в даному напрямку продовжують розвиватися в середовищі конкурентів, самим значимим з яких вважається EMAN. Незважаючи на подібність базових принципів названих пакетів (кожний з них одержує на вхід безліч мікрофотографій і видає 3D-модель із більш-менш високою роздільною здатністю), виявлення кращого з них проблематично, оскільки кожна кріо-ЕМ-лабораторія віддає перевагу певному пакету програм, що позначається на всіх аспектах її багаторічної роботи аж до техніки підготовки зразків для фотографування. Головним інструментом кріо-ЕМ слугують традиційні методики ТЕМ.

В якості модельної рослини широко використовують арабідопсис *Arabidopsis thaliana* L. Heynh., яка вирощується в умовах лабораторного аналога оранжереї [3]. Простежена динаміка формування субстратного мікробіоценозу (рис.1) та виявлені бактеріально-грибні асоціації. Нова технологія дозволила зафіксувати міжклітинні контакти мікроорганізмів ценозу з використанням електронної скануючої мікроскопії (рис.2).

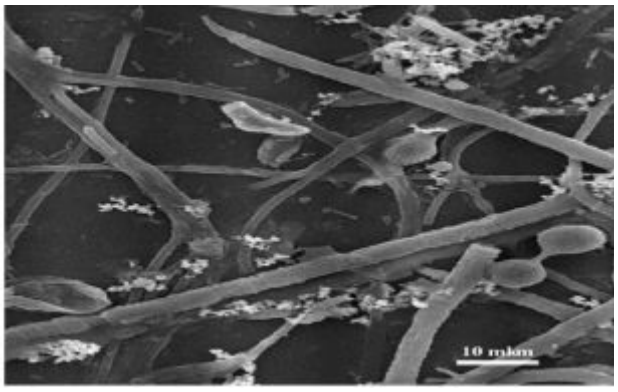


Рис.1 Мікробно-грибна асоціація ризосферної зони рослин арабідопсису (пізня стадія формування)

На протязі всього часу існування технології кріо-ЕМ, мікроскопісти боролися за автоматизацію розпізнавання часток, намагаючись пристосувати до рішення цього завдання чи не кожен з методів, відомих у теорії обробки та сегментації зображень – від клітинних автоматів до нейронних мереж. Донедавна їхні зусилля залишалися марними, і вчені були змушені вказувати положення часток на фотографіях вручну, присвячуючи цій надзвичайно монотонній роботі астрономічну кількість людино-годин (впровадженню технології crowdsourcing перешкоджає відсутність достатнього числа виконавців, знайомих з азами молекулярної біології).

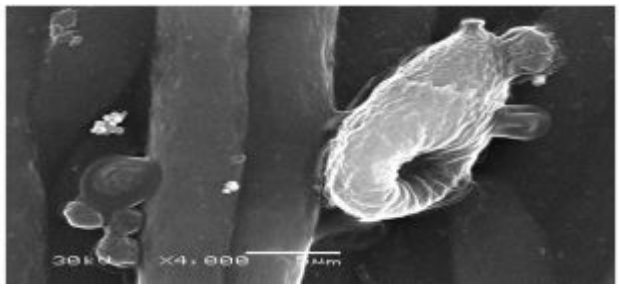


Рис.2. Контакти між представниками різних таксонів мікроорганізмів (ризосферна зона арабідопсиса)

Сьогодні рабська праця стала пережитком минулого: провідним лабораторіям світу, що конкурують за лідерство в області кріо-ЕМ, вдалося автоматизувати добір часток за допомогою різних «фірмових» алгоритмів евристичного характеру, а також підвищення стійкості наступних обчислювальних етапів до помилок розпізнавання. Зокрема, нами запропонована керована нелінійна гратка для обробки зображень. Теоретичною базою відновлення тривимірних структур об'єктів за їх двомірними проекціями служить також інтегральна геометрія, початок якій закладений роботою австрійського математика Іоганна Радона, в 1917 р. який винайшов так званий метод зворотної проекції.

4. Оптимізаційний підхід до класифікації зображень ТЕМ

Підхід до обробки зображень трансмісійного електронного мікроскопу базується на системному використанні нелінійних методів фільтрації, класифікації й розпізнавання образів. Використано метод опорних векторів для класифікації наноструктур на основі застосування даних ТЕМ.

Метод опорних векторів (SVM – support vector machines) – це набір схожих алгоритмів виду «навчання із вчителем», що використовуються для завдань класифікації та регресійного аналізу. Цей метод належить до сімейства лінійних класифікаторів. Особливою властивістю методу опорних векторів є безперервне зменшення емпіричної помилки класифікації й збільшення зазору. Тому цей метод також відомий як метод класифікатора з максимальним зазором.

Основна ідея методу опорних векторів – переведення вихідних векторів у простір більш високої розмірності та пошук поділяючої гіперплощини з максимальним зазором у цьому просторі. Дві паралельних гіперплощини будуються по обидва боки гіперплощини, що розділяє наші класи. Поділяюча гіперплощина максимізує відстань до двох відповідних паралельних гіперплощин. Алгоритм працює в припущенні, що чим більше різниця або відстань між цими паралельними гіперплощинами, тим меньше буде середня помилка класифікатора.

Знайдено пару гіперплощин, які дають максимальну ширину смуги, шляхом розв'язку наступної задачі оптимізаційної з обмеженнями

$$\min_{\mathbf{w}} \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2,$$

при умові

$$z_{j'}(\mathbf{x}_{j'} \cdot \mathbf{w} + b) - 1 \geq 0 \quad \forall j',\ j' = 1,\ldots, J'.$$

5. Класифікації мікробіоценозів

Один з підходів до класифікації зображень ТЕМ на k класів в залежності від структури мікроценозу заснований на методі опорних векторів. Для навчання алгоритма використано еталонні структури. Валідація моделі класифікації проводилась з використанням знань експертів. Після того, як була проведена класифікація зображень, результати порівнювались з результатами класифікації експертами. Якщо результати відрізнялись, пропонувалось заново навчити алгоритм класифікації. Експериментальні дослідження показали на високу ймовірність правильного розпізнавання структури ТЕМ зображення.

6. Висновки

Описано перспективні інформаційні технології дослідження мікробіоценозів в умовах мікрогравітації, запропоновано методи математичного моделювання та класифікації для використання в космічному рослинництві. Представлено методику вивчення й порівняння способів організації мікробіоценозу в коріннях рослини та біля неї, як в умовах Землі, так і в космічних польотах. Проведено аналіз можливостей математичного моделювання архітектури мікробіоценозів з використанням сучасних методів вимірювань та класифікації. Запропоновано використовувати метод опорних векторів для класифікації зображень мікроценозів з урахуванням процедури валідації. Методи дослідження можуть бути використані в різних областях знань, зокрема в екології та сільському господарстві.

Список використаних джерел

1. *Дзержинская И.С., Сопрунова О.Б.*, Шадрина О.И. Специфические формы жизни техногенных водных экосистем // Материалы международной научной конференции «Автотрофные микроорганизмы», посвященной 75-летию со дня рождения академика Е.Н.

Кондратьевой., Москва, 13-15 декабря 2000 г. Москва, 2000. -С. 69-70.
2. *Кордюм Є.Л., Чепмен Д.К.* Рослини в космосі.- К.: Академперіодика, 2007.- 216 с.
3. *Кордюм В.А, Мошинец Е.В.*, Цапенко М.В., Адамчук-Чалая Н.И., Иродов Д.М., Андриенко В.И. Микроорганизмы ризосферы – полный мониторинг // Грунтознавство.- 2008, т. 9, № 1-2, С. 53-63.
4. *Adamchuk N.I., Yatsenko V.A.* Plants in space: measurement, modeling, and experiments // 9th Ukranian conference on space research, Kyiv, 2009.-P.102.
5. *Halstead T.W. and Dutcher F.R.* Plants in space. // Annu. Rev. Plant Physiol. -1987. №38.-P. 317-345.
6. *Kacena M.A., Merrell G.A., Manfredi B., Smith E.E., Klaus D.M., Todd P.* Bacterial growth in space flight: logistic growth course parameters for *Escherichia coli* and *Bacillus subtilis* // Appl. Microbiol. and Biotechnol. - 1999. - 51, 2. - P. 229-234.
7. *Kordyum E.L.* Biology of plant cells in microgravity and under clinostating // Int. Rev. Cytol. - 1997. - 171. - P. 1-78.
8. *Kordyum V.A., Manko V.F., Mashinsky A.L., Nechitailo G.S., Popova A.F.* Changes in symbiotic and associative interrelations in a higher plant-bacteria system during space flight // Adv. Space Res. - 1983. - 3 (9). - P. 265-269.
9. *Popova A.F.* Submicroscopic organization of Anabaena azollas Strasb. Cells under space flight conditions. In: Kosmicheskaya Biologiya i Biotekhnologiya (K.M. Sytnik, Ed.). -Kiev: Naukova Dumka. - 1986. - P. 18-22.
10. *Torguik V., Daase F., Sandaa R.-A., Queas L.* Novel techniques for analysing microbial diversity in natural and perturbed environments // J. Biotechnol. - 1998. -64, 1. -P. 53-62.
11. *Yatagai F., Saito T., Takahashi A., Fujie A., Nagaoka S., Sato M., Ohmishi T.* Mutation induction in the *rsp*d gene on an *Escherichia coli - Bacillus subtilis* shuttle vector by space flight on MIR // Abstr. 41-st Annu. Meet. Jap. Radiat. Res. Soc. Nagasaki, Dec. 2-4, 1998. Res.- 1998.-39,4.-P. 415.

References

1. DZERZHINSKAYA I.S., SOPRUNOVA O.B., SHADRINA O.I. (2000), *Specifical forms of lives of technogenic water ecosystems*, Proceedings of the International Conference «Autotrophic microorganisms», dedicated to the 75th anniversary of academician E.N. Kondrateva, Moscow, pp. 69-70.
2. KORDYUM E.L., CHAPMAN D.K. (2007), *Plants in space*, Academperiodyka, 216 pages.
3. KORDYUM V.A., MOSHINETS E.V. TSAPENKO M.V. ADAMCHUK-CHALA N.I., IRODOV D.M., ANDRIENKO V.I. (2008), *Rhizosphere microorganisms - full monitoring*, Gruntoznavstvo, Vol. 9, № 1-2, pp. 53-63.
4. ADAMCHUK N.I., YATSENKO V.A. (2009), *Plants in space: measurement, modeling, and experiments*, 9th Ukranian conference on space research, Kyiv, p.102.
5. HALSTEAD T.W. and DUTCHER F.R. (1987), *Plants in space*, Annu. Rev. Plant Physiol, #38, pp. 317-345.
6. KACENA M.A., MERRELL G.A., MANFREDI B., SMITH E.E., KLAUS D.M., TODD P. (1999), *Bacterial growth in space flight: logistic growth course parameters for Escherichia coli and Bacillus subtilis*, Appl. Microbiol. and Biotechnol., 51(2), pp. 229-234.
7. KORDYUM E.L. (1997), *Biology of plant cells in microgravity and under clinostating*, Int. Rev. Cytol, #171. pp. 1-78.
8. KORDYUM V.A., MANKO V.F., MASHINSKY A.L., NECHITAILO G.S., POPOVA A.F. (1983), *Changes in symbiotic and associative interrelations in a higher plant-bacteria system during space flight*, Adv. Space Res., #3(9). pp. 265-269.
9. POPOVA A.F. (1986), *Submicroscopic organization of Anabaena azollas Strasb. Cells under space flight condition,* In Kosmicheskaya Biologiya i Biotekhnologiya (K.M. Sytnik, Ed.), Kiev, Naukova Dumka, pp.18-22.
10. TORGUIK V., DAASE F., SANDAA R.-A., QUEAS L. (1998), *Novel techniques for analysing microbial diversity in natural and perturbed environments*, J. Biotechnol, #64(1). pp. 53-62.
11. YATAGAI F., SAITO T., TAKAHASHI A., FUJIE A., NAGAOKA S., SATO M., OHMISHI T. (1998), *Mutation induction in the rspd gene on an Escherichia coli - Bacillus subtilis shuttle vector by space flight on MIR*, Abstr. 41-st Annu. Meet. Jap. Radiat. Res. Soc. Nagasaki, #39(4), p. 415

Надійшла до редколегії 9.07.14

УДК 519.8

Брила А.Ю.[1], к.ф.-м.н., доц.,
Антосяк П.П.[2], к.ф.-м.н.

Досяжність нечітких цілей у заданій субординації строгого ранжування

[1]Ужгородський національний університет, 88000, м. Ужгород, вул. Університетська, 14
e-mail: brila_andrij@ukr.net
[2]Ужгородський національний університет, 88000, м. Ужгород, вул. Університетська, 14
e-mail: antosp@ukr.net

A.Yu. Brila[1], Ph.D.,
P.P. Antosyak[2], Ph.D.

Attainability of fuzzy goals in a defined subordination of strict ranking

[1]Uzhgorod National University, 88000, Uzhgorod, Universitetska str., 14,
e-mail: brila_andrij@ukr.net
[2]Uzhgorod National University, 88000, Uzhgorod, Universitetska str., 14,
e-mail: antosp@ukr.net

Розглядається задача прийняття рішень із нечітко визначеними цілями, які упорядковано за важливістю. Пропонується звести дану задачу прийняття рішення як задачу лексикографічної оптимізації до задачі однокритеріальної оптимізації, цільова функція якої є додатною лінійною згорткою часткових критеріїв.

Ключові слова: нечітка ціль, лексикографічна оптимізація, досяжність.

The decision-making problem with fuzzy goals are considered. Such problems, for example, are in the case of decision-making based on the opinions of several experts who formulate the estimation not clearly. Goals are ranking by importance, i.e. the strict subordination ranking on set of corresponding membership functions are defined. The set of allowed solutions (alternatives) is a subset of the integer numbers.

Based on the properties of the considered problem is proposed to reduce this decision-making problem which is the lexicographical optimization problem with to the one criterion optimization problem with objective function which is a positive linear convolution of partial criteria. This method allows to reduce the optimization problem with of the vector criterion function to a optimization problem with scalar objective function, which allows to apply known methods for its solve. The proved theorem, justifying that ability. The cases with different kinds of membership functions are considered, and for each of them the corresponding rules for calculating of the coefficients of positive linear convolution are described.

Key Words: fuzzy goal, lexicographic optimization, attainability.

Статтю представив д.т.н. Волошин О.Ф.

Вступ

У багатьох задачах прийняття рішень нечітка ціль задачі визначається як нечітка підмножина універсальної множини альтернатив (у загальному випадку також нечітка). Розв'язати цю задачу − означає досягти цілі з тим чи іншим ступенем належності та з урахуванням ступеня належності до множини альтернатив [1].

У [2] запропоновано підхід до розв'язання задачі прийняття рішень із нечіткими цілями (підхід Белмана-Заде) для випадку рівноважливих нечітких цілей та випадку, коли відомі коефіцієнти відносної важливості ступеню належності до множини альтернатив і відносної важливості цілей.

У даній статті запропоновано підхід до розв'язання задачі із нечіткими цілями для випадку, коли нечіткі цілі упорядковано за важливістю, тобто на множині відповідних функцій належностей задано субординацію строгого ранжування.

Постановка задачі

Нехай $X\ (X \subset Z)$ − універсальна множина альтернатив (розв'язків). Нечіткими цілями можуть бути нечіткі підмножини X типу:

1) «величина x повинна бути приблизно в межах від b до c»;
2) «величина x повинна бути близькою до b»;
3) «величина x не повинна бути більшою за b»;
4) «величина x не повинна бути меншою за b».

Кожна нечітка ціль подається відповідною функцією належності ([1,3])

$$\mu_i(x),\ i=1,2,...,q\ ,\ \text{де}\ 0 \le \mu_i(x) \le 1,\ i=1,2,...,q\ .$$

©А.Ю. Брила, П.П. Антосяк, 2014

Нечіткі цілі упорядковано за важливістю, тобто на множині відповідних функцій належностей задано субординацію строгого ранжування $Rg(1,2,...,q)$. Позначимо κ^L критерій, що є векторною згорткою критеріїв $\mu_i, i=1,2,...,q$ у субординації $Rg(1,2,...,q)$ з векторною цільовою функцією

$$F(x)=(\mu_1(x),\mu_2(x),...,\mu_q(x)).$$

Задача знаходження непокращуваного розв'язку у заданій субординації строгого ранжування є задачею лексикографічної оптимізації [4]

$$\max^L F(x), x\in X\ . \qquad (1)$$

У [5] запропоновано підхід до розв'язання лінійної задачі лексикографічної оптимізації, що ґрунтується на зведенні її до задачі однокритеріальної оптимізації, цільова функція якої є додатною лінійною згорткою часткових критеріїв. У даній статті розглянемо аналогічний підхід до розв'язання задачі (1) та з урахуванням властивостей розглядуваної задачі.

Досяжність оптимальних розв'язків задачі (1)

Спочатку дослідимо випадок, коли для кожної із функцій належностей

$$\mu_i(x)\in\{0,1\},\ x\in X, i\in\{1,2,...,q\}. \qquad (2)$$

Графічно такі функції виглядають так:

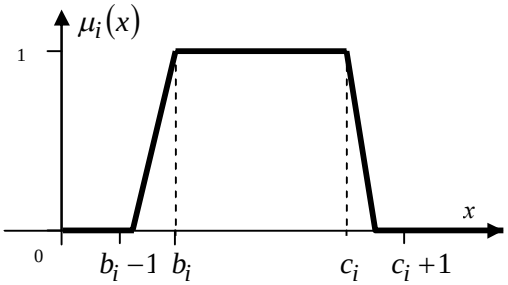


Рис. 1. *«Величина x повинна бути приблизно в межах від b до c»*

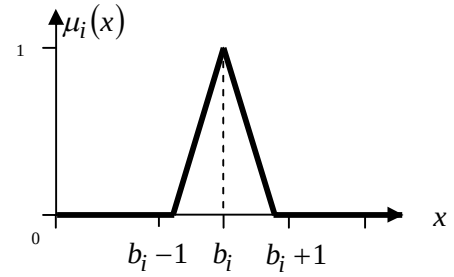


Рис. 2. *«Величина x повинна бути близькою до b»*

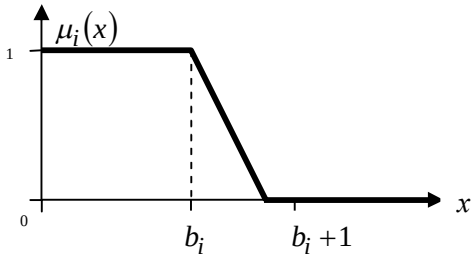


Рис. 3. *«Величина x не повинна бути більшою за b»*

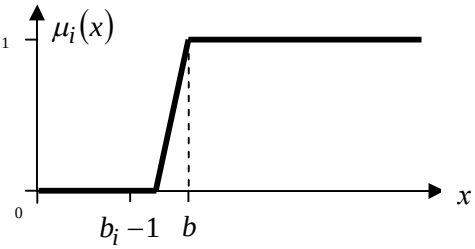


Рис. 4. *«Величина x не повинна бути меншою за b»*

Будемо вважати, що параметри b_i, c_i, $i=1,2,...,q$ є цілочисловими.

Позначимо X^* множину оптимальних розв'язків цієї задачі.

Постає питання, чи існує такий набір додатних коефіцієнтів $\alpha_i, i-1,2,...,q$, що функціонал $L(x)=\sum_{i=1}^{q}\alpha_i\mu_i(x)$ представляв би лексикографічний порядок віддачі переваги на множині X.

Нехай коефіцієнт $\alpha_q>0$ вибрано довільним чином, а інші додатні коефіцієнти вибрано згідно умови

$$\alpha_i > \sum_{l=i+1}^{q}\alpha_l,\ i=q-1,q-2,...,1. \qquad (3)$$

Розглянемо задачу однокритеріальної оптимізації зі скалярною цільовою функцією

$$\max L(x), x\in X \qquad (4)$$

Позначимо $\overline{X}^*$ множину оптимальних розв'язків задачі (4).

Якщо розв'язок багатокритеріальної задачі оптимізації може бути отриманий як розв'язок відповідної однокритеріальної задачі, з цільовою функцією, яка є лінійною згорткою критеріїв цієї багатокритеріальної задачі оптимізації, то вважають ([4]), що даний розв'язок є досяжним за зваженою сумою різноважливих критеріїв

Теорема 1. *Розв'язок задачі* (4) *є розв'язком задачі* (1).

Доведення. Для доведення теореми достатньо показати, що порядок віддачі переваги, що задає критерій κ^L на множині X за правилом віддачі переваги є підпорядком порядку віддачі переваги, що задає функціонал $L(x)$ на множині X. Тобто необхідно довести, що для всяких $x, y \in X$ з умови $F(x) >^L F(y)$ випливає відношення $L(x) > L(y)$.

Відношення $F(x) >^L F(y)$ справедливе у q випадках, тому доведення проведемо за q кроків

Крок 1. Нехай $F(x) >^L F(y)$ і $\mu_1(x) > \mu_1(y)$. Враховуючи (1) можемо сказати, що $\mu_1(x) = 1$, а $\mu_1(y) = 0$. Доведемо, що $L(x) > L(y)$. Розглянемо різницю

$$L(x) - L(y) = \alpha_1 \mu_1(x) + \sum_{i=2}^{q} \alpha_i \mu_i(x) - \alpha_1 \mu_1(y) - \sum_{i=2}^{q} \alpha_i \mu_i(y) =$$

$$= \alpha_1 + \sum_{i=2}^{q} \alpha_i \mu_i(x) - \sum_{i=2}^{q} \alpha_i \mu_i(y) \geq$$

$$\geq \alpha_1 - \sum_{i=2}^{q} \alpha_i \mu_i(y) \overset{(2)}{\geq} \alpha_1 - \sum_{i=2}^{q} \alpha_i \overset{(3)}{>} 0$$

Отже, $L(x) > L(y)$.

Крок k $(2 \leq k \leq q)$. Нехай $F(x) >^L F(y)$ і $\mu_i(x) = \mu_i(y), i = 1,2,...,k-1$, а $\mu_k(x) > \mu_k(y)$. Враховуючи (1) можемо сказати, що $\mu_k(x) = 1$, а $\mu_k(y) = 0$. Доведемо, що $L(x) > L(y)$. Розглянемо різницю

$$L(x) - L(y) = \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i \mu_i(x) + \alpha_k \mu_k(x) + \sum_{i=k+1}^{q} \alpha_i \mu_i(x) -$$

$$- \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i \mu_i(x) - \alpha_k \mu_k(y) - \sum_{i=k+1}^{q} \alpha_i \mu_i(y) =$$

$$= \alpha_k + \sum_{i=k+1}^{q} \alpha_i \mu_i(x) - \sum_{i=k+1}^{q} \alpha_i \mu_i(y) \geq$$

$$\geq \alpha_k - \sum_{i=k+1}^{q} \alpha_i \mu_i(y) \overset{(2)}{\geq} \alpha_1 - \sum_{i=2}^{q} \alpha_i \overset{(3)}{>} 0$$

Отже, $L(x) > L(y)$.

Оскільки ми довели, що порядок віддачі переваги, що задає критерій κ^L на множині X за правилом віддачі переваги є підпорядком порядку віддачі переваги, що задає функціонал $L(x)$ на множині X, то згідно з теоремою 1.16 у [4] одержимо $\overline{X}^* \subset X^*$. Теорема доведена.

Отже, ґрунтуючись на даній теоремі та правилах вибору додатних коефіцієнтів (3) ми можемо знаходити досяжні оптимальні розв'язки задачі (1) з векторною цільовою функцією шляхом розв'язання задачі (4) зі скалярною цільовою функцією.

Розглянемо тепер задачу лексикографічної оптимізації з нечіткими цільовими функціями (1), відмовившись від умови (2). Графічне представлення цільових функцій набуде вигляду:

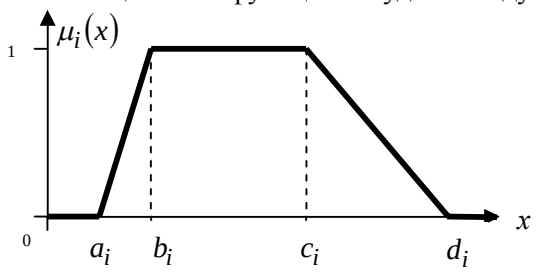


Рис. 5. *«Величина x повинна бути приблизно в межах від b до c»*

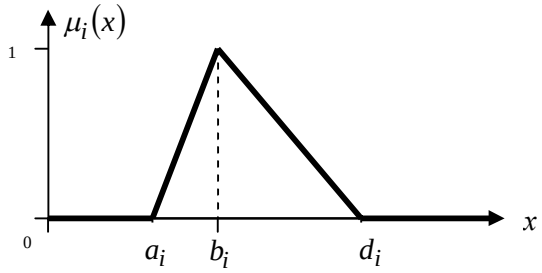


Рис. 6. *«Величина x повинна бути близькою до b»*

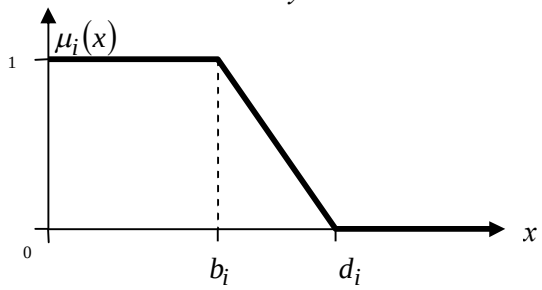


Рис. 7. *«Величина x не повинна бути більшою за b»*

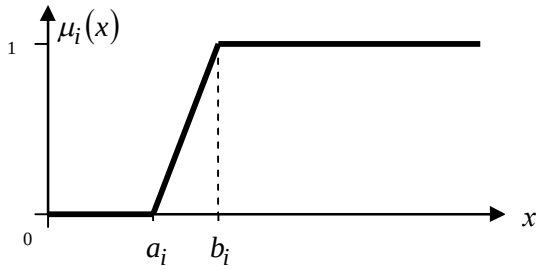


Рис. 8. *«Величина x не повинна бути меншою за b»*

Будемо вважати, що параметри a_i, b_i, c_i, d_i, $i = 1,2,...,q$ є цілочисловими. Позначимо X^{**}

множину оптимальних розв'язків такої лексикографічної задачі оптимізації з довільними функціями.

Дослідимо проблему відшукання досяжних оптимальних розв'язків. Нехай $\beta_q > 0$ довільне додатне число, а інші поступово визначено з

$$\beta_i > \frac{1}{\alpha_i} \sum_{l=i+1}^{q} \beta_l,\ i = q-1, q-2, ..., 1, \qquad (5)$$

де

$$\alpha_i = \min_{\mu_i(x) \neq \mu_i(y)} |\mu_i(x) - \mu_i(y)|,\ i = 1,2,...,q. \qquad (6)$$

З використанням коефіцієнтів β_i, знайдених згідно з (5), побудуємо функціонал

$$Z(x) = \sum_{i=1}^{q} \beta_i \mu_i(x)$$

і задачу однокритеріальної оптимізації зі скалярною цільовою функцією

$$\max Z(x), x \in X. \qquad (7)$$

Позначимо $\overline{X}^{**}$ множину оптимальних розв'язків цієї задачі.

Теорема 2. *Якщо* $x^* \in \overline{X}^{**}$, *то* $x^* \in X^{**}$.

Доведення. Для доведення цієї теореми, як і при доведенні теореми 1, достатньо показати, що порядок віддачі переваги, що задає критерій κ^L на множині X за правилом віддачі переваги є підпорядком порядку віддачі переваги, що задає функціонал $Z(x)$ на множині X. Тобто необхідно довести, що для всяких $x, y \in X$ з умови $F(x) >^L F(y)$ випливає відношення $Z(x) > Z(y)$.

Відношення $F(x) >^L F(y)$ справедливе у q випадках, тому доведення проведемо за q кроків

Крок 1. Нехай $F(x) >^L F(y)$ і $\mu_1(x) > \mu_1(y)$. Доведемо, що $Z(x) > Z(y)$. Розглянемо різницю

$$Z(x) - Z(y) = \beta_1\mu_1(x) + \sum_{i=2}^{q} \beta_i\mu_i(x) - \beta_1\mu_1(y) - \sum_{i=2}^{q} \beta_i\mu_i(y) =$$

$$= \beta_1(\mu_1(x) - \mu_1(y)) + \sum_{i=2}^{q} \beta_i\mu_i(x) - \sum_{i=2}^{q} \beta_i\mu_i(y) \geq$$

$$\geq \beta_1(\mu_1(x) - \mu_1(y)) - \sum_{i=2}^{q} \beta_i\mu_i(y) \geq \beta_1\alpha_1 - \sum_{i=2}^{q} \beta_i \overset{(5)}{>} 0.$$

Отже, $Z(x) > Z(y)$.

Крок k $(2 \leq k \leq q)$. Нехай $F(x) >^L F(y)$ і $\mu_i(x) = \mu_i(y), i = 1,2,...,k-1$, а $\mu_k(x) > \mu_k(y)$. Доведемо, що $Z(x) > Z(y)$. Розглянемо різницю

$$Z(x) - Z(y) = \sum_{i=1}^{k-1} \beta_i\mu_i(x) + \beta_k\mu_k(x) + \sum_{i=k+1}^{q} \beta_i\mu_i(x) -$$

$$- \sum_{i=1}^{k-1} \beta_i\mu_i(x) - \beta_k\mu_k(y) - \sum_{i=k+1}^{q} \beta_i\mu_i(y) =$$

$$= \beta_k(\mu_k(x) - \mu_k(y)) + \sum_{i=k+1}^{q} \beta_i\mu_i(x) - \sum_{i=k+1}^{q} \beta_i\mu_i(y) \geq$$

$$\beta_k(\mu_k(x) - \mu_k(y)) - \sum_{i=k+1}^{q} \beta_i\mu_i(y) \geq$$

$$\geq \beta_1\alpha_k - \sum_{i=2}^{q} \beta_i > 0.$$

Отже, $Z(x) > Z(y)$.

Оскільки ми довели, що порядок віддачі переваги, що задає критерій κ^L на множині X за правилом віддачі переваги є підпорядком порядку віддачі переваги, що задає функціонал $Z(x)$ на множині X, то згідно з теоремою 1.16 у [4] одержимо $\overline{X}^{**} \subset X^{**}$. Теорема доведена.

Зауваження 1. Зауважимо, що коефіцієнти α_i для кожної із функцій $\mu_i(x)$ можна знайти наступним чином:

1) «величина x повинна бути приблизно в межах від b до c»

$$\alpha_i = \min\left\{\frac{1}{b_i - a_i}, \frac{1}{d_i - c_i}\right\};$$

2) «величина x повинна бути близькою до b»

$$\alpha_i = \min\left\{\frac{1}{b_i - a_i}, \frac{1}{d_i - b_i}\right\};$$

3) «величина x не повинна бути більшою за b»

$$\alpha_i = \frac{1}{d_i - b_i};$$

4) «величина x не повинна бути меншою за

$$\alpha_i = \frac{1}{b_i - a_i}.$$

Приклад

Нехай потрібно прийняти рішення відносно значення деякої величини на основі наступних суджень експертів:

експерт 1: "*значення величини не повинно перевищувати 1*";

експерт 2: "*значення величини повинно коливається десь у межах від 2 до 4*";

<u>експерт 3</u>: "*значення величини повинно бути біля 5*";

<u>експерт 4</u>: "*значення величини повинно бути біля 6*";

І нехай ці нечіткі експертні оцінки формалізовано функціями належності у відповідності до наступного рисунка:

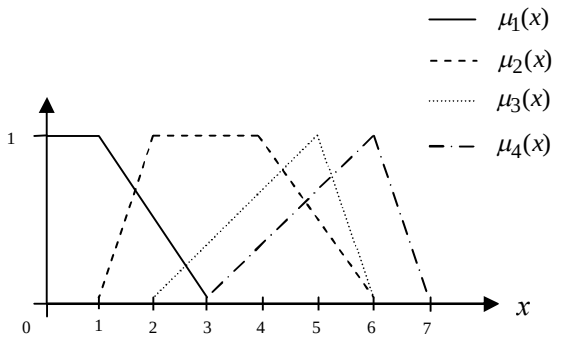


Рис. 9. *Формалізовані судження експертів*

Визначимо коефіцієнти β_i, $i=1,2,3,4$ та з урахуванням зауваження 1. Маємо:

$$\alpha_3=\min\left\{\frac{1}{6-5},\frac{1}{5-2}\right\}=\frac{1}{3},$$

$$\alpha_2=\min\left\{\frac{1}{2-1},\frac{1}{6-4}\right\}=\frac{1}{2},$$

$$\alpha_1=\frac{1}{3-1}=\frac{1}{2},$$

$$\beta_4=1,$$

$$\beta_3=4>\frac{1}{\alpha_3}\beta_4=3,$$

$$\beta_2=11>\frac{1}{\alpha_2}(\beta_4+\beta_3)=10,$$

$$\beta_1=33>\frac{1}{\alpha_1}(\beta_4+\beta_3+\beta_1)=32.$$

У відповідності до (7) маємо:

$$\max\{33\mu_1(x)+11\mu_2(x)+4\mu_3(x)+\mu_4(x)\},$$
$$x\in X=[1,7].$$

Як розв'язок отримаємо $\overline{X}^{**}=\{2\}$.

Висновки

Запропонований підхід до розв'язання задачі прийняття рішень із нечітко визначеними цілями, які строго упорядковано за важливістю зводиться до лексикографічної задачі оптимізації. Розглянуто та обґрунтовано можливість звести задачу з векторною цільовою функцією до задачі однокритеріальної оптимізації зі скалярною цільовою функцією, що в свою чергу дає можливість застосувати для її розв'язання відомі методи.

Список використаних джерел

1. *Волошин О.Ф., Мащенко С.О.* Моделі та методи прийняття рішень. – К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2010. – 336 с.
2. *Беллман Р.* Принятие решений в расплывчатых условиях / *Беллман Р., Заде Л.* — В кн.: Вопросы анализа и процедуры принятия решений. — М.: Мир — 1976. — С. 172-215.
3. *Рыжов А. П.* Элементы теории нечетких множеств и измерения нечет-кости / А. П. Рыжов. — М.: Диалог-МГУ, 1998. — 116 с.
4. *Червак Ю.Ю.* Оптимізація. Непокращуваний вибір / Ю.Ю. Червак – Ужгород: Ужгород. нац. ун-т, 2002. – 312 с.
5. *Подиновский В.В.* Оптимизация по последовательно применяемым критериям / В.В. Подиновский, В.М. Гаврилов. – М.: Сов. Радио, 1975. –115с.

References

1. VOLOSHYN O.F., MASHENKO S.O. (2010) *Modeli ta metody pryjnyatya rishen.* Kyiv: Vydavnycho-polihrafichnyj centr Kyyivskyj universytet.
2. BELLMAN R., ZADEH L. (1976). *Prinyatie resheniy v rsplyvschatych usloviyach. V knige: Voprosy analiza i procedury prinyatiya reshenij*. Moskva: Mir. pp. 172-215.
3. RYZOV A.P. (1998) *Elementy teorii nechetkich mnozestv i izmereniya nechetkosti*. Moskva: Dialog-MGU.
4. CHERVAK Yu.Yu. (2002) *Optymizaciya. Nepokraschuvanyj vybir*. Uzhgorod: Uzhgorodskyj nacionalnyj universytet.
5. PODINOVSKIJ V.V., GAVRILOV V.M. (1975) *Optimizacija po posledovatelno primenjayemym kriteriyam*. Moskva: Sovetskoe radio.

Надійшла до редколегії 12.05.2014

UDC 519.9

Garashchenko F.G., prof.,
Kruchinin D.S., aspirant.

On numerical studies of the dynamics of a beam in electrophysical installations

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d
e-mail: fedir47@gmail.com

Ф.Г. Гаращенко, проф.,
Д.С. Кручинін, аспірант.

Про чисельні дослідження динаміки пучка в електрофізичних установках

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: fedir47@gmail.com

In the present work, we consider some stable methods of numerical solution of the differential equations of motion of charged particles. The methods of regularization are applied to the determination of stable trajectories. The numerical solution of the system of equations for current Lyapunov indices allows us to find the operator of regularization in the form of a Jackson integral operator with the similarity index determining the dimension of a Lyapunov trajectory. The connection between the damping decrement and the similarity coefficient is made more precise.

Key Words: stable methods, Lyapunov indices, damping decrement.

В даній роботі розглянуті стійкі методи чисельного розв'язання диференціальних рівнянь руху заряджених частинок. Застосовано методи регуляризації для визначення стійких траєкторій. Чисельне рішення системи рівнянь для поточних показників Ляпунова дозволяє визначати оператор регуляризації у вигляді інтегрального оператора Джексона з індексом подібності, що визначає розмірність ляпуновської траєкторії. Уточнено зв'язок між декрементом загасання і коефіцієнтом подібності.

Ключові слова: стійкі методи, показники Ляпунова, декремент загасання.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Хусаінов Д.Я.

1. Introduction

One of the most complicated electrophysical problems is the problem of formation of the stable beams of charged particles. The computational complexities increase in the presence of factors causing the nonlinear effects and unstable modes. From the computational viewpoint, we deal with a severely ill-posed task.

We now present a typical system of equations describing the dynamics of charged particles in linear resonance accelerating-focusing systems with drift pipes [1-4]:

$$\frac{d\gamma}{d\xi} = \alpha(\xi)\cos\varphi,$$

$$\frac{d\varphi}{d\xi} = \frac{2\pi\gamma}{\sqrt{\gamma^2 - 1}},$$

$$\frac{d^2x}{d\xi^2} = \frac{\gamma}{\gamma^2 - 1}\{[-\frac{1}{2}\frac{d\alpha}{d\xi} + g(\xi)]x - \alpha(\xi)\frac{dx}{d\xi}\}\cos\varphi, \quad (1)$$

$$\frac{d^2y}{d\xi^2} = \frac{\gamma}{\gamma^2 - 1}\{[-\frac{1}{2}\frac{d\alpha}{d\xi} - g(\xi)]y - \alpha(\xi)\frac{dy}{d\xi}\}\cos\varphi,$$

$$\xi \in [0, T].$$

Here, γ and φ are the reduced energy and phase of particles, x, y are the transverse coordinates, $\xi = \frac{z}{\lambda}$ is the dimensionless longitudinal coordinate, λ is the wavelength of a high-frequency field, $\alpha(\xi)$ is a continuous differentiable function describing the field strength amplitude on the axis of the system, $g(\xi)$ is the controlling function determining a field asymmetry in the accelerating

© F.G. Garaschenko, D.S.Kruchynin, 2014

gaps related to the use of electrodes in the form of elliptic cylinders.

2. Stable methods of numerical solution of the differential equations of motion of charged particles

The equations of motion of particles (1) involve instabilities, and the algorithm of their solution should be developed with regard for this factor. This goal is ensured by a nonlinear algorithm based not on the Taylor expansion, but on the expansion of a trajectory in continued fractions. The method possesses the A-stability and can be successfully used in the adaptive version with variable order in order to obtain the required accuracy.

We now describe briefly one of such nonlinear methods of the Runge-Kutta type of the third order, by presenting the initial problem as

$$y' = f(x, y),$$
$$y(x_0) = y_0.$$

On the interval $[x_0, X]$, we choose a network $\{x_n, 0 \le n \le N\}$ and expand the solution $y(x)$ by the Thiele formula [8,9], by restricting ourselves to a fraction with three links,

$$y_{n+1} = y_n + \cfrac{h}{\grave{y} + \cfrac{h}{\grave{\grave{y}} + \cfrac{h}{\grave{\grave{\grave{y}}}}}}, \qquad (2)$$

where we used the notation

$$y_n \equiv y(x_n), \quad h \equiv x_{n+1} - x_n, \qquad (3)$$
$$\grave{y} \equiv \frac{1}{y'}\Big|_{x=x_n}, \quad \grave{\grave{y}} \equiv -\frac{2(y')^2}{y''}\Big|_{x=x_n},$$
$$\grave{\grave{\grave{y}}} \equiv -\frac{3(y'')^2}{2(y')^2 y'' - 3y'(y'')^2}\Big|_{x=x_n}.$$

Starting from (2), we will seek numerical solutions in the form

$$y_{n+1} = y_n + hy_n + h^2 \frac{(k_2 - k_1)^2}{p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3}, \qquad (4)$$

where we introduce the functions

$$k_1 = f(x_n, y_n), \quad k_2 = f(x_n + \alpha_2 h, y_n + \beta_{21} h k_1),$$
$$k_3 = f(x_n + \alpha_3 h, y_n + \beta_{32} h k_2) \qquad (5)$$

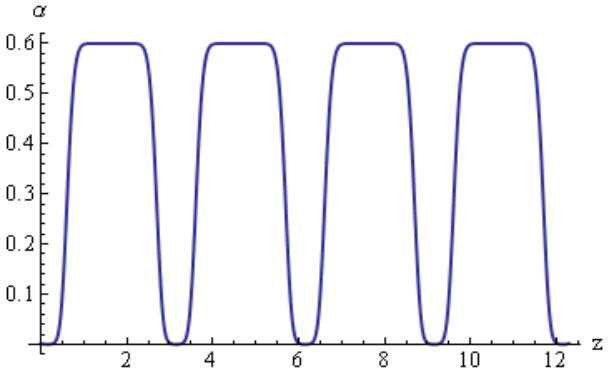


Fig. 1. Plot of the function $\alpha(z)$

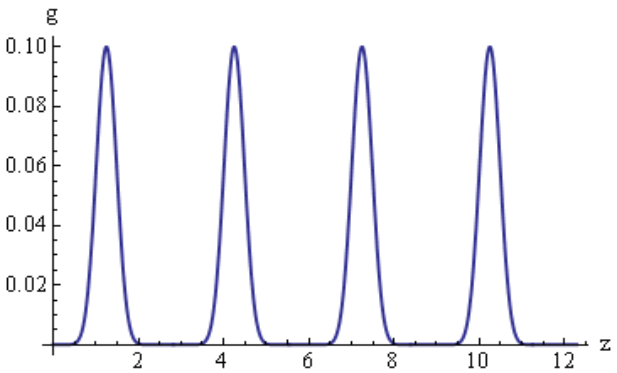


Fig. 2. Plot of the function $g(z)$

with parameters that satisfy the following imposed connections:

$$\alpha_2 = \beta_{21} \text{ and } \alpha_3 = \beta_{31} + \beta_{32}. \qquad (6)$$

The free parameters are chosen in view of the convergence of the expansions of both a solution of the problem and the right-hand side of Eq. (2) in the Taylor series up to terms with as high as possible powers of h.

Some freedom in the choice of parameters of the scheme is remained. We will choose the free parameters of the obtained system of equations for the parameters of the method so that the last link of the continued fraction gives the local accuracy of the method.

In such a way, the stability and the control over the accuracy in the process of solution by means of a change in the order of the algorithm are ensured.

For the numerical analysis of system (1), we choose the model functions presented in Figs. 1 and 2.

As a result of calculations, we obtain the energy of a particle in an accelerator as a function of the longitudinal coordinate (see Figs. 3 and 4).

The dependences of the transverse coordinates of particles on the longitudinal coordinate in an accelerator are shown in Fig. 5.

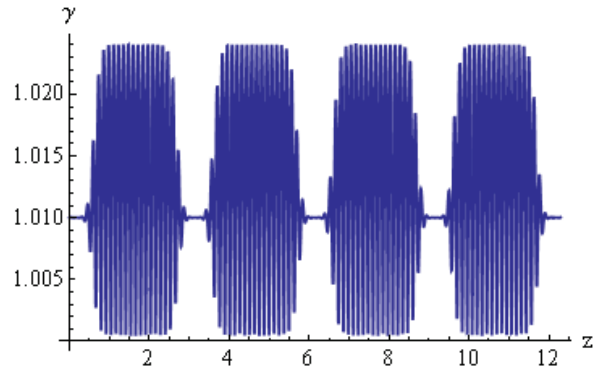


Fig. 3. Energy of a particle versus the longitudinal coordinate

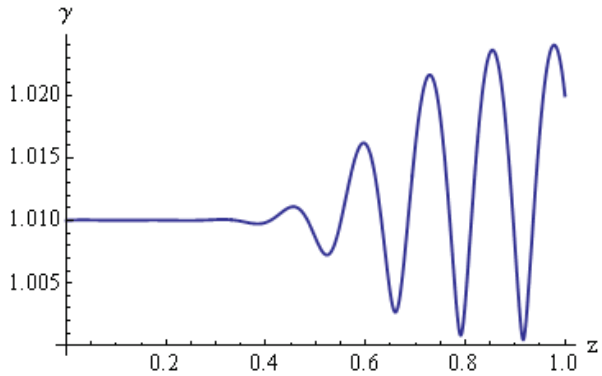


Fig.4. Initial section of the plot of the energy of a particle as a function of the longitudinal coordinate

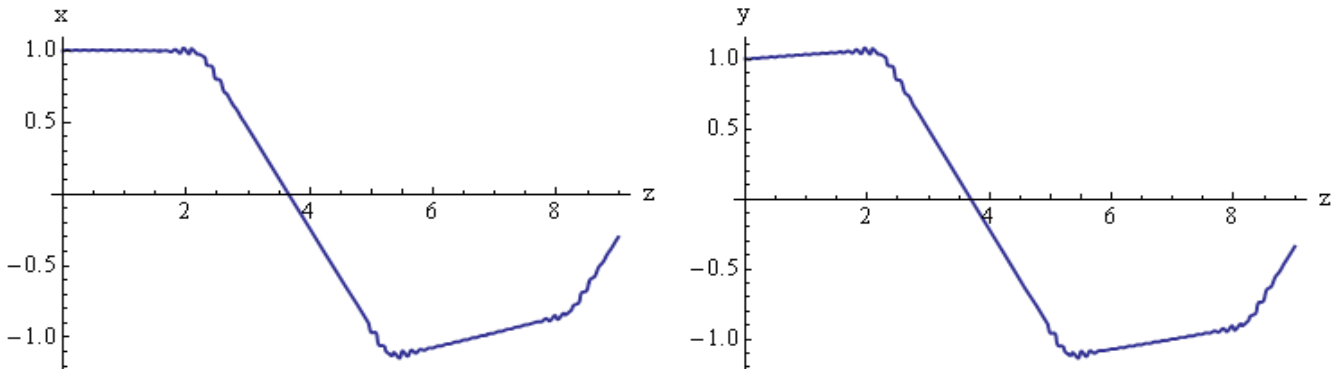


Fig. 5. Transverse coordinates versus the longitudinal coordinate

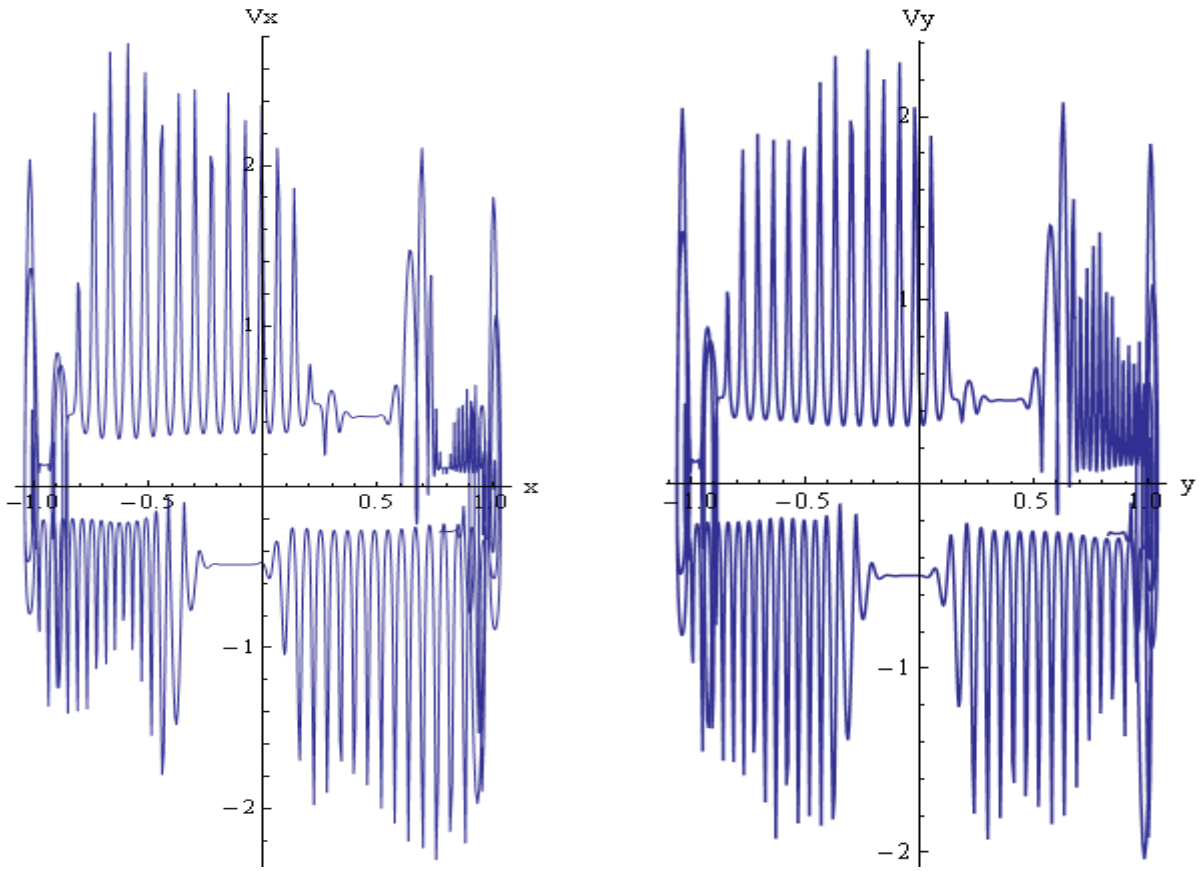


Fig. 6. Phase plane

In Fig. 6, we give the corresponding projections of trajectories of a particle in the phase space.

It is seen that, despite the instability of the problem of determination of the trajectories of particles in an accelerator, the use of the methods possessing a practical stability on the basis of the second Lyapunov method, Lyapunov function, and nonlinear numerical algorithms allows us to perform the reliable numerical analysis of the trajectories of charged particles in an accelerator.

3. On the application of the methods of regularization to the determination of steady trajectories

By $x(t)$, we denote a real process running in the physical system under study. Let the dynamical system have the embedding dimension equal to de, and let it be described by an ordinary differential equation of the order equal to de. The operator causing the highest instability in such equation is the higher-derivative operator. Therefore, the regularizing operator of the system is constructed with regard for the higher-derivative operator.

For simplicity, we consider the equation $D^{de}y = z$. We note that the ill-posed problem of determination of a derivative by the time series of a quantity is usually written in the form of the integral equation D^{-de}. It is possible to show that the regularizing operator for the operator D^{-de} has the form [2] of a fractional integro-differential operator $R^{\alpha} = D^{d_e-\alpha}$ of the order $d_e - \alpha$.

The regularizing operator plays the role of an inverse operator in the equation of a dynamical system.

In order to solve ill-posed problems, the special methods of regularization, which are successfully used for a long time in many applied studies, were developed [6]. In work [7], a modification of the methods of regularization is proposed on the basis of fractional integro-differential operators [8] and quantum analysis [9].

In our case, the term of the evolution equation with the higher derivative should be replaces by R^{α} (in order to obtain the stable unique solution as a result of the special smoothing of the initial series). However, the order of a differential equation (operator) can be conserved, if we introduce new smoothed variables with the use of a regularizing operator:

$$D^{d_e-\alpha}y = D^{d_e}z(t),\ z(t) = R_f^{\alpha}y(t); R_f^{\alpha} = D^{-\alpha}. \quad (7)$$

The integral operator of smoothing of the variables R_f^{α} transforms the unstable solution of the dynamical system in a stable one. The regularizing parameter must naturally satisfy the following condition: if the dimension of an attractor is not fractional, but is integer, then the regularizing parameter must be zero.

The choice with $\alpha = \{d_f\}$ satisfies this condition. Here, $\{z\}$ is the fractional part of z, and d_f is any dimensional characteristic of the degree of chaoticity of a trajectory and the instability under a perturbation of the initial conditions. It can be the Lyapunov dimension of a trajectory, correlative dimension, etc.

The application of modified methods of regularization allows one to construct nonlinear numerical algorithms for the analysis of trajectories in acelerators with the use of Lyapunov indices characterizing the divergence of trajectories.

The use of this approach was successful in the analysis of systems with dynamical chaos [10] and in the description of Josephson quantum tunneling effects [11].

The efficiency of these algorithms in the solution of equations involving the instabilities is related, first of all, to that they realize practically the self-consistent method of averaging in the dynamics of particles in an accelerator. The averaging leads to the self-consistent "dissipative" character of the motion of particles, whose degree of "dissipation" is connected with Lyapunov indices.

The analytic dependences of the indices of fractional and quantum operators on the value of efficient "dissipation" were obtained in [12-14], which makes the practical use of these algorithms to be convenient.

The Lyapunov indices describing the divergence of trajectories of the system in the phase space are ones of the most important characteristics of a dynamical system. Below, we will consider the convenient apparatus of current Lyapunov indices, which can be introduced for an arbitrary differential dynamical system in the *n*-dimensional space in the following way.

Let the system be described by the system of differential equations

$$\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}, t). \quad (8)$$

In order to determine the Lyapunov indices, we need to analyze the evolution of a vector $\vec{y}$ tangent to the trajectory of the system in the phase space.

This evolution can be determined from the linearized system of equations

$$\dot{\vec{y}} = J(\vec{x},t)\vec{y}\ , \tag{9}$$

where $J(\vec{x},t) = \partial\vec{F}(\vec{x},t)/\partial\vec{x}$ is the Jacobian of the dynamical system. The current Lyapunov indices can be determined now through the evolution of vectors in the tangent space:

$$\mu_k(t) = \frac{d}{dt}\ln\left\|\vec{y}_k(t)\right\|. \tag{10}$$

The quantities $\mu_k(t)$ are the indicators of a change of the flow in the phase space in a vicinity of the trajectory $\vec{x}(t)$ along the vector $\vec{y}_k$.

The usually used characteristic Lyapunov indices λ_k defined as

$$\lambda_k = \lim_{T\to\infty}\left(\frac{1}{T}\ln\frac{\left\|\vec{y}_k(T)\right\|}{\left\|\vec{y}_k(0)\right\|}\right) \tag{11}$$

can be given in terms of the current Lyapunov indices by averaging over the time:

$$\lambda_k = \lim_{T\to\infty}\left(\frac{1}{T}\int_0^T \mu_k(t)dt\right). \tag{12}$$

We now deduce the equations describing the evolution of the tangent vectors and, hence, the current Lyapunov indices. To this end, we introduce the generalized spherical coordinates instead of the Cartesian ones for the vectors in the tangent space: $\rho = \left(\sum_{k=1}^{n} y_k^2\right)^{1/2}$ is the modulus of a vector, and $n-1$ angles φ_1, φ_2, …, φ_{n-1} are determined from the relations:

$$\ldots\ldots\ldots\ldots..$$
$$y_{n-1}(t) = \rho(t)\sin\left(\varphi_1(t)\right)\sin\left(\varphi_2(t)\right)\ldots\sin\left(\varphi_{n-2}(t)\right)\cos\left(\varphi_{n-1}(t)\right)$$
$$y_n(t) = \rho(t)\sin\left(\varphi_1(t)\right)\sin\left(\varphi_2(t)\right)\ldots\sin\left(\varphi_{n-2}(t)\right)\sin\left(\varphi_{n-1}(t)\right)$$

In the new coordinates, Eq. (2) takes the form

$$\frac{d}{dt}y_k = \sum_{i=1}^{n} J_{ki}y_i\ ,\ k = 1,\ldots,n\ . \tag{14}$$

Using Eqs. (6) and (7), it is possible to obtain the equations for angles. Then the modulus of a tangent vector can be determined in terms of the angles and the Jacobian. We now give the explicit formulas in the spherical coordinates for the vectors tangent to a trajectory in the important case of a three-dimensional space: $y_1(t) = \rho(t)\cos\left(\varphi_1(t)\right)$

$$y_2(t) = \rho(t)\sin\left(\varphi_1(t)\right)\cos\left(\varphi_2(t)\right) \tag{15}$$

$$y_3(t) = \rho(t)\sin\left(\varphi_1(t)\right)\sin\left(\varphi_2(t)\right).$$

The equations for the two angles take the form

$$\frac{d\varphi_1(t)}{dt} = -\sin^2\left(\varphi_1(t)\right)\left(J_{12}\cos\left(\varphi_2(t)\right) + J_{13}\sin\left(\varphi_2(t)\right)\right) + \cos^2\left(\varphi_1(t)\right)\left(J_{21}\cos\left(\varphi_2(t)\right) + J_{31}\sin\left(\varphi_2(t)\right)\right) +$$
$$\frac{1}{2}\sin\left(\varphi_1(t)\right)\cos\left(\varphi_1(t)\right)\left(\left(-2J_{11} + J_{22} + J_{33}\right) + \left(J_{22} - J_{33}\right)\cos\left(2\varphi_2(t)\right) + \left(J_{23} + J_{32}\right)\sin\left(2\varphi_2(t)\right)\right), \tag{16}$$

$$\frac{d\varphi_2(t)}{dt} = \frac{1}{8}\Big(4\left(J_{32} - J_{23}\right) + 4\left(J_{32} + J_{23}\right)\cos\left(\varphi_2(t)\right)^2 +$$
$$+8J_{31}\cos\left(\varphi_2(t)\right)\mathrm{ctg}\left(\varphi_1(t)\right) - J_{21}\left(7 + \cos\left(2\varphi_1(t)\right)\right)\mathrm{ctg}\left(\varphi_1(t)\right)\sin\left(\varphi_2(t)\right) -$$
$$4\left(J_{32} - J_{23}\right) + 4\left(J_{32} + J_{23}\right)\cos\left(\varphi_2(t)\right)^2 + 8J_{31}\cos\left(\varphi_2(t)\right)\mathrm{ctg}\left(\varphi_1(t)\right)\Big). \tag{17}$$

In this case, the logarithmic derivative of the modulus of the tangent vector, in terms of which the values of current Lyapunov indices can be calculated, is as follows:

$$\frac{1}{\rho(t)}\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{1}{\Delta}\Big(J_{11}\cos\left(\varphi_1(t)\right)^2 + \cos\left(\varphi_1(t)\right)\sin\left(\varphi_1(t)\right)\left(\left(J_{12} + J_{21}\right)\cos\left(\varphi_2(t)\right) + \left(J_{13} + J_{31}\right)\sin\left(\varphi_2(t)\right)\right) +$$
$$+\sin\left(\varphi_1(t)\right)^2\left(J_{22}\cos\left(\varphi_2(t)\right)^2 + \left(J_{23} + J_{32}\right)\cos\left(\varphi_2(t)\right)\sin\left(\varphi_2(t)\right) + J_{33}\sin\left(\varphi_2(t)\right)^2\right)\Big) \tag{18}$$

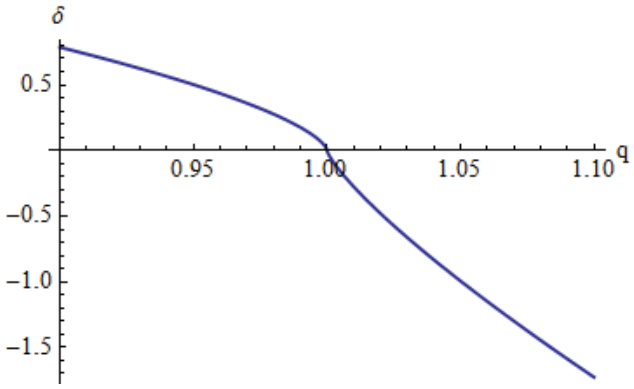


Fig. 7. Obtained approximate connection between the damping decrement and the similarity coefficient of the Jackson operator under condition of the maximum proximity of solutions

$$\Delta = \left(\cos\left[\varphi_1(t)\right]^2 + \sin\left[\varphi_1(t)\right]^2\right)\left(\cos\left[\varphi_2(t)\right]^2 + \sin\left[\varphi_2(t)\right]^2\right)$$

The proposed algorithm allows us to obtain not only the solution of Eqs. (13)-(18), but also the corresponding spectrum of Lyapunov indices. With the help of the obtained Lyapunov indices, we can construct the operator of regularization.

The regularization of the equations describing the dynamics (oscillations) leads to the change of the higher ordinary derivative in them by the corresponddding fractional operator or Jackson operator. As was shown in [13], the solutions of the equations with Jackson operators are similar locally to the solutions of linear equations with damping or growth of oscillations. The use of the given algorithms allows one to correct the connection between the Jackson operator index and the damping decrements or growth increments of oscillations, which approximate a fractal oscillator (see [13]). The approximation of the mentioned dependence takes the form $\delta(q) = \begin{cases} 3.4931(1-q)^{0.6473}, q<1 \\ -10.8126(q-1)^{0.7969}, q>1 \end{cases}$ and is shown in Fig. 7.

The negative values of a decrement correspond to oscillations with increasing amplitudes.

4. Conclusions

We have proposed a stable nonlinear method of numerical solution of a system of differential equations jointly with the equations for the current Lyapunov indices given in the explicit form. The numerical solution of the system of equations for the current Lyapunov indices allowed us to define the operator of regularization in the form of a Jackson integral operator with the similarity index determining the dimensionality of a Lyapunov trajectory. The connection between the damping decrement and the similarity coefficient has been made more precise.

References

1. *Бублик Б.Н., Гаращенко Ф.Г., Кириченко Н.Ф.* Структурно-параметрическая оптимизация и устойчивость динамики пучков. – Киев: Наука думка, 1985. – 305 с.
2. *Гаращенко Ф.Г.* О численном подходе решения задач устойчивости на конечном интервале времени // Доклады АН УССР. – 1981. – Сер. А. – № 11. – С. 78–81.
3. *Капчинский И.М.* Динамика частиц в линейных резонансных ускорителях. – Москва: Атомиздат, 1966. – 310 с.
4. *Овсянников Д.А.* Математические методы управления пучками. – Ленинград: Изд-во Ленингр. ун-та, 1980. – 228 с.
5. *Башняков О.М., Гаращенко Ф.Г., Пічкур В.В.* Практична стійкість та структурна оптимізація динамічних систем. – Київ: ВПЦ "Київський університет", 2000. – 197с.

References

1. BUBLIK, B.N., GARASCHENKO, F.G., KIRICHENKO, N.F. (1985) *Structural Parametric Optimization and Stability of the Dynamics of Beams*. Kyiv: Naukova Dumka.
2. GARASCHENKO, F.G. (1981) On a numerical approach to the solution of problems of stability on a finite time interval. *Dokl. AN USSR. Ser. A.* No. 11. pp. 78-81.
3. KAPCHINSKII, I.M. (1966) *Dynamics of Particles in Linear Resonance Accelerators*. Moscow: Atomizdat.
4. OVSYANNIKOV, D.A. (1980) *Mathematical Methods of Control over Beams*. Leningrad: Leningrad Univ.
5. BASHNYAKOV, O.M., GARASCHENKO, F.G., PICHKUR, V.V. (2000) *Practical Stability and Structural Optimization of Dynamical Systems*. Kyiv: Kyiv Univ.

6. *Тихонов А.Н.*, Методы решения некорректных задач. – Москва: Наука, 1979.
7. *Bolotov V.N., Novikov V.E.*, Описание хаотических динамических систем регуляризационными методами // Материалы 7-й международной крымской микроволновой конференции, КРЫМИКО 97 15-18 сентября 1997 г., т. 1, с. 264.
8. *Джрбашьян М.М.*, Интегральные преобразования и представления функций в комплексной области. – Москва: Наука, 1966.
9. *Kac V., Cheung P.*, Quantum Calculus. – New York: Springer, 2002.
10. *Магда И.И., Новиков В.Е., Пащенко А.В., Шаповал И.Н.*, Технология адаптивного тестирования состояний нелинейных систем, ее приложение к типичным СВЧ устройствам и хаотическая связь // Успехи современной радиоэлектроники. – 2005. – № 11. – С. 47–55.
11. *Kruchinin S., Klepikov V., Novikov V., Kruchinin D.*, Nonlinear current oscillations in a fractal Josephson junction // Materials Science. – 2005. – Vol. 23 (4). – pp. 1009–1013.
12. *Kruchinin S.P., Adamenko S.V., BogolyubovN.N., Novikov V.E.*, Self-organization and nonequilibrium structures in the phase space // International Journal of Modern Physics B. – 2008. – Vol. 22, No. 13, pp. 2025–2045.
13. *Garaschenko F., Kruchinin D., Novikov V.*, Quantum analysis of oscillatory processes in fractal media // International Journal of Modern Physics B. – 2008. –Vol. 22. – pp. 3923–3929.
14. *Гаращенко Ф.Г., Кручинін Д.С.,* Оцінки областей практичної стійкості з еліпсоїдальними фазовими обмеженнями і їх використання // Вісник Київського університету імені Тараса Шевченка. – 2011. –Серія фізико-математичні науки – № 3. – С. 123–130.

6. TIKHONOV, A.N., ARSENIN, V.Ya. (1979) *Methods of Solution of Ill-Posed Problems*. Moscow: Nauka.
7. BOLOTOV, V.N., NOVIKOV, V.E. (1997) Description of chaotic dynamical systems by regularization methods, *Proceedings of the 7-th Intern. Crimean Microwave Conference*, KRYMIKO 97, September 15-18, vol. 1, p. 264.
8. DZHRBASH'YAN, M.M. (1966) *Integral Transformations and Representations of Functions in the Complex Domain.* Moscow: Nauka.
9. KAC, V., CHEUNG, P. (2002) *Quantum Calculus*, New York: Springer.
10. MAGDA, I.I., NOVIKOV, V.E., PASHCHENKO, A.V., SHAPOVAL, I.N. (2005) The technology of adaptive testing of the states of nonlinear systems, its application to typical SHF devices, and chaotic communication. *Achievements of Modern Radioelectronics.* No. 11. pp. 47-55.
11. KRUCHININ, S., KLEPIKOV, V., NOVIKOV, V., KRUCHININ, D. (2005) Nonlinear current oscillations in a fractal Josephson junction. *Materials Science*. 23 (4). pp. 1009-1013.
12. KRUCHININ, S.P., ADAMENKO, S.V., BOGOLYUBOV, N.N., NOVIKOV, V.E. (2008) Self-organization and nonequilibrium structures in the phase space. *Int. J. of Mod. Phys. B.* 22. No. 13. pp. 2025-2045.
13. GARASCHENKO, F., KRUCHININ, D., NOVIKOV, V. (2008) Quantum analysis of oscillatory processes in fractal media. *Int. J. of Mod. Phys. B*. 22. pp. 3923- 3929.
14. GARASCHENKO, F.G., KRUCHININ, D.S. (2011) Estimates of the of practical stability domains with ellipsoidal phase limitations and their use. *Bulletin of Taras ShevchenkoNational University of Kyiv, Series Physics & Mathematics.* No. 3, pp. 123-130.

Надійшла до редколегії 22.04.14

УДК 519.6

Глебена М.І., к.ф.-м.н.

Чисельний метод оптимізації логарифмічно увігнутих функцій двох дійсних змінних

Ужгородський національний університет, 88000, м. Ужгород, вул. Університетська, 14
e-mail: HlebenaM@gmail.com

M.I. Hlebena, Ph.D.

Numerical method of optimization of logarithmically concave functions of two real variables

Uzhgorod National University, 88000, Uzhgorod, Universitetska str., 14
e-mail: HlebenaM@gmail.com

Розглядається задача відшукання екстремуму логарифмічно увігнутих функцій двох дійсних змінних. Пропонується новий чисельний метод, який ґрунтується на використанні апарату некласичних мажорант і діаграм Ньютона функцій.

Ключові слова: методи оптимізації, мажоранта та діаграма Ньютона.

In the paper the problem of finding the extremum logarithmically concave functions of two real variables is considered. A new numerical method of zero order is proposed to solve this problem. It is based on the properties of non-classical device majorants and Newton diagrams of functions of two real variables that is defined tabular. It is no need to build majorant Newton algorithm to find the extremum, thus numerical properties inclinations and deviations Newton majorants are used. This proposed method is used to find the extrema as smooth so non-smooth logarithmically concave functions of two real variables. To select the initial approximation it is not necessary to know in which circle is the point of extremum. This method is convergent for some initial approximation and obtains a solution accurate to step value.

The advantages of the method over the classical optimization methods and their modifications are convergency (that does not depend on the choice of initial approximation), simplicity and clarity.

Key Words: method of optimization, majorant and diagram of Newton.

Статтю представив д.т.н. Волошин О.Ф.

Вступ

В [1] побудовано апарат некласичних мажорант і діаграм Ньютона функцій однієї дійсної змінної, заданих таблично, який знайшов широке застосування для побудови нових чисельних методів розв'язування окремих класів задач алгебри, математичного аналізу та диференціальних рівнянь. Зокрема, його використано для розробки чисельних методів розв'язування задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь і їхніх систем, точних на певних класах функцій, чисельних методів оптимізації як гладких, так і негладких функцій однієї та багатьох дійсних змінних (типу покоординатного підйому) [2].

В [3] побудовано апарат некласичних мажорант і діаграм Ньютона функцій двох дійсних змінних, заданих таблично, який використано для розробки чисельного методу обчислення подвійних інтегралів, точного на певному класі функцій; деяких чисельних методів відшукання екстремуму негладких функцій двох дійсних змінних [4]. Зауважимо, що у випадку негладких функцій задача їх оптимізації в [5] розв'язується з використанням поняття субградієнта.

В даній роботі, використовуючи апарат некласичних мажорант і діаграм Ньютона функцій двох дійсних змінних, заданих таблично, приводиться новий чисельний метод відшукання

©М.І.Глебена, 2014

логарифмічно увігнутих функцій двох дійсних змінних. Основна перевага цього методу над класичними методами оптимізації та їхніми модифікаціями полягає в такому:

- збіжність методу не залежить від вибору початкового наближення;
- для роботи методу не треба знати, в якому околі знаходиться точка екстремуму;
- оптимізаційна функція може бути як гладкою, так і негладкою;
- простота та наглядність методу.

Апарат некласичних мажорант і діаграм Ньютона функцій двох дійсних змінних, заданих таблично [3]

Нехай в області $D=\{a\le x\le b,\ c\le y\le d\}$ визначена логарифмічно вгнута функція $f(x,y)$, яка може бути як гладкою, так і негладкою. Побудуємо в області D сітку:

$$x_i=a+ih_1,\quad i=0,1,\dots,n,\ h_1=(b-a)/n,$$
$$y_j=c+jh_2,\quad j=0,1,\dots,m,\ h_2=(d-c)/m.$$

Позначимо $f(x_i,y_j)=a_{ij}\quad (i=0,1,\dots,n;\ j=0,1,\dots,m)$. У просторі xyz побудуємо множину точок $P_{ij}(x_i,y_j,-\ln a_{ij})$ (точки зображень) з координатами $x=x_i,\ y=y_i,\ z=-\ln a_{ij}$ $(i=0,1,\dots,n;\ j=0,1,\dots,m)$. З кожної точки P_{ij} проведемо півпряму в додатному напрямі осі Oz, перпендикулярно до площини xy. Множину точок цих півпрямих позначимо через S, а її опуклу оболонку – через $C(S)$. Для кожної точки $(x,y)\in D$ визначимо точку $B(x,y,\kappa(x,y))$, де

$$\chi(x,y)=\inf_{(x,y,z)\in C(S)} z.$$

Множина точок $B(x,y,\chi(x,y)),\ (x,y)\in D$, утворює багатогранну поверхню δ_f, яка обмежує $C(S)$ знизу. Ця поверхня є неперервною, опуклою і її рівняння має вигляд

$$z=\chi(x,y),\quad (x,y)\in D.$$

Позначимо $M_f(x,y)=exp(-\chi(x,y)),\quad (x,y)\in D.$

Позаяк функція $f(x,y)$ є логарифмічно вгнутою, тоді всі точки зображення P_{ij} знаходяться у вершинах діаграми Ньютона δ_f, а всі пари індексів (i,j) будуть вершинними і для кожної точки (x_i,y_j) $(i=0,1,\dots,n;\ j=0,1,\dots,m)$ виконується рівність $M_f(x_i,y_j)=a_{ij}$. Отже, апроксимуюча функція $M_f(x,y),\ (x,y)\in D,$ є некласичною мажорантою Ньютона для значень a_{ij} $(i=0,1,\dots,n;\ j=0,1,\dots,m)$, а δ_f – некласичною діаграмою Ньютона.

Величини

$$R_{ij}(x)=\left(\frac{a_{i-1,j}}{a_{ij}}\right)^{\frac{1}{h_1}}$$
$$(i=1,2,\dots,n;\ j=0,1,\dots,m;\ R_{0j}=0)$$

і

$$R_{ij}(y)=\left(\frac{a_{i,j-1}}{a_{ij}}\right)^{\frac{1}{h_2}}$$
$$(j=1,2,\dots,m;\ i=0,1,\dots,n;\ R_{i0}=0)$$

називатимемо $(i,j)-$ми числовими нахилами мажоранти Ньютона $M_f(x,y)$ відповідно в напрямку осей абсцис і ординат, а величини

$$D_{ij}(x)=\frac{R_{i+1,j}(x)}{R_{ij}(x)}$$
$$(i=1,2,\dots,n-1;\ j=0,1,\dots,m;\quad D_{0j}=D_{nj}=\infty)$$

і

$$D_{ij}(y)=\frac{R_{i,j+1}(y)}{R_{ij}(y)}$$
$$(j=1,2,\dots,m-1;\ i=0,1,\dots,n;\quad D_{i0}=D_{im}=\infty)$$

називатимемо $(i,j)-$ми відхиленнями мажоранти Ньютона $M_f(x,y)$ відповідно в напрямку осей Ox і Oy.

Із опуклості вниз поверхні δ_f випливають такі нерівності

$$R_{ij}(x)\le R_{i+1,j}(x)$$
$$(i=0,1,\dots,n-1;\ j=0,1,\dots,m),$$
$$R_{ij}(y)\le R_{i,j+1}(y)$$
$$(j=0,1,\dots,m-1;\ i=0,1,\dots,n),$$
$$D_{ij}(x)\ge 1\quad (i=1,2,\dots,n-1;\ j=0,1,\dots,m),$$
$$D_{ij}(y)\ge 1\quad (j=1,2,\dots,m-1;\ i=0,1,\dots,n).$$

Алгоритм методу

Спочатку зауважимо, якщо для деякої точки $(x_k,y_l)\in D$ виконуються умови:

$$R_{kl}(x)\le 1,\ R_{k+1,l}(x)\ge 1, \qquad (1)$$
$$R_{kl}(y)\le 1,\ R_{k,l+1}(y)\ge 1, \qquad (2)$$

то точка (x_k, y_l) з точністю $\varepsilon \le max(h_1, h_2)$ є точкою екстремуму функції $f(x,y)$.

Якщо умова (1) не виконується, то

$$R_{kl}(x) < 1,\ R_{k+1,l}(x) \le 1, \quad (3)$$

або

$$R_{kl}(x) \ge 1,\ R_{k+1,l}(x) > 1. \quad (4)$$

При невиконанні умови (2)

$$R_{kl}(y) < 1,\ R_{k,l+1}(y) \le 1, \quad (5)$$

$$R_{kl}(y) \ge 1,\ R_{k,l+1}(y) > 1. \quad (6)$$

Вибравши за початкове наближення екстремальної точки будь-яку точку $(x_k, y_l) \in D$, алгоритм методу є таким.

1. Якщо для точки (x_k, y_l) виконуються умови (1), (2), то точка (x_k, y_l) з точністю $\varepsilon \le max(h_1, h_2)$ приймається за оптимальну і на цьому робота алгоритму завершується.
2. Якщо для точки (x_k, y_l) не виконується умова (1), а виконується умова (2), то у випадку (3) знаходимо найменше значення індекса $\mu > 1$, для якого $R_{k+\mu,l}(x) > 1$; у випадку (4) знаходимо найменше значення індекса $\nu > 1$, для якого $R_{k-\nu,l}(x) \le 1$. Знайшовши найближчу до (x_k, y_l) точку, для якої виконується умова (1), і позначивши цю точку через (x_k, y_l), переходимо до пункту 1.
3. Якщо для точки (x_k, y_l) виконується умова (1), а не виконується умова (2), то у випадку (5) знаходимо найменше значення індекса $\mu > 1$, для якого $R_{k,l+\mu}(y) > 1$; у випадку (6) знаходимо найменше значення індекса $\nu > 1$, для якого $R_{k,l-\nu}(x) \le 1$. Знайшовши найближчу до (x_k, y_l) точку, для якої виконується умова (2), і позначивши цю точку через (x_k, y_l), переходимо до пункту 1.
4. Якщо для точки (x_k, y_l) умови (1), (2) не виконуються, то аналогічно як в пункті 2 знаходимо найближчу до (x_k, y_l) точку, для якої виконується умова (1). Позначивши цю точку через (x_k, y_l), аналогічно як в пункті 3 знаходимо найближчу до (x_k, y_l) точку, для якої виконується умова (2). Позначивши цю точку через (x_k, y_l), переходимо до пункту 1.

Якщо з більшою точністю треба знайти екстремальну точку, то за область D беремо окіл знайденої точки, зменшуємо кроки h_1 і h_2 і виконуємо описаний алгоритм.

Приклад

Розглянемо задачу мінімізації штрафної функції №2 [6] при $n = 2$.

$$f(x,y) = (x-1)^2 + (y-1)^2 + 10^{-3}(x^2 + y^2 - 0.25)^2$$

Графік цієї функції зображено на рис.1.

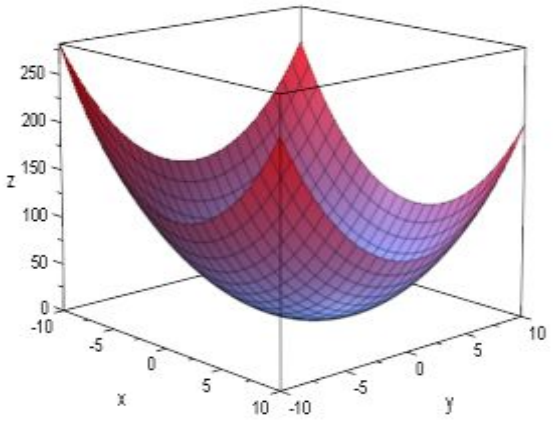


Рис.1.

Функція $f(x,y)$ є строго опуклою, тому шукатимемо максимум функції

$$-f(x,y)+10 = -(x-1)^2 - (y-1)^2 - 10^{-3}(x^2 + y^2 - 0.25)^2 + 10,$$

оскільки $-f(x,y)+10 > 0$ в області $D = \{-1 \le x \le 2,\ -1 \le y \le 2\}$.

Нехай $m = n = 100$, виберемо за початкове наближення точку $(x_{50}, y_{40}) = (0{,}5; 0{,}2)$. Для цієї точки виконується умова (3) та (5), застосуємо пункт 4 побудованого алгоритму. Знайдемо найменше значення індекса μ для якого $R_{50+\mu,40}(x) > 1$. Така нерівність виконується для $R_{67,40}(x) = 1{,}005727$. На наступному кроці шукаємо найменше значення індексу μ для якого $R_{67,40+\mu}(y) > 1$, в результаті чого одержуємо $R_{67,67}(y) = 1{,}005766$. Тоді точку (1,01;1,01) приймаємо за перше наближення до оптимальної.

Для уточнення одержаної точки застосуємо алгоритм у області

$D = \{0{,}9 \le x \le 1{,}1;\ 0{,}9 \le y \le 1{,}1\}$, при $m = n = 100$. Максимум розглядуваної функції досягається в точці (0,996;0,996), а її значення в цій точці дорівнює $f(x,y) = 0{,}003038867$.

Висновки

Запропоновано новий чисельний метод відшукання екстремуму як гладких, так і негладких логарифмічно увігнутих функцій двох дійсних змінних, в основі якого лежить використання апарату некласичних мажорант і діаграм Ньютона функцій двох дійсних змінних, заданих таблично. Перевагами методу є збіжність, яка не залежить від вибору початкового наближення. Збіжнісь методу випливає із опуклості вниз діаграми Ньютона δ_f. Згідно алгоритму початкове наближення вибираємо довільним чином, а напрям руху від точки до точки вибираємо в залежності від виконання нерівностей для числових нахилів. Тобто, з будь-якої точки області, в якій шукаємо екстремум, будемо рухатись до точки екстремуму. В результаті застосування алгоритму одержимо розв'язок з точністю до величини кроку.

Список використаних джерел

1. *Цегелик Г.Г.* Теория мажорант и диаграмм Ньютона функций, заданных таблично, и ее приложение //Укр. мат. журн.- 1989.- Т.41.- №9. с.1273-1276.
2. *Цегелик Г.Г.* Апарат некласичних мажорант і діаграм Ньютона функцій, заданих таблично, та його використання в чисельному аналізі: монографія / Г.Г.Цегелик. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2013.- 190с.
3. *Цегелик Г.Г. Федчишин Н.В.* Апарат некласичних мажорант і діаграм Ньютона функцій двох дійсних змінних, заданих таблично // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. мех.-мат. 1998. Вип.50. с.209-211.
4. *Глебена М.І.* Математичні моделі та числові методи мажорантного типу для аналізу дискретних оптимізаційних процесів: автореф. дис. на здобуття ступеня канд. фіз.-мат. наук спец. 01.05.02 „Математичне моделювання та обчислювальні методи" / М.І Глебена. – Івано-Франківськ, 2012. – 23с.
5. *Шор Н.З.* Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения.- К.: Наук. думка, 1979.- 199с.
6. *Koko J.* A conjugate gradient method with quasi-Newton approximation /J.Koko // Applicationes mathematicae. -2000. -№ 27. P.153-165.

References

1. *H. Tsehelyk* The theory of majorant and diagrams Newtonian functions which are given discretely and its application //Ukr. mat. journal. - 1989.- T.41.- №9. c.1273-1276.
2. *H. Tsehelyk* Apparatus of non-classical majorants and diagrams Newtonian functions which are given discretely and and its use in the numerical analysis Lviv: 2013.- P.190.
3. *H.Tsehelyk, N Fedchishin* The apparatus of non-classical majorants and Newton diagrams of functions of two real variables defined tabular. // Herald Lviv Univ. Series. mech.-mat.-1998 ed.50. p.209-211.
4. *Hlebena M.* Mathematical models and numerical methods of majorant type for analysis of discrete optimization processes*:* Abstract thesis for the obtaining the Candidate of Physical and Mathematical Sciences degree on the speciality 01.05.02. – mathematical modeling and computational methods. Ivano-Frankivsk, 2012. -p.23.
5. *Shor N.* Methods of minimization of nondifferentiable functions and their application. Kiev*:* 1979.- 199*p*.
6. *Koko J.* A conjugate gradient method with quasi-Newton approximation /J.Koko // Applicationes mathematicae. -2000. -№ 27. P.153-165.

Надійшла до редколегії 12.09.2014

УДК 004.655

Глушко І.М., к.ф.-м.н.

Узагальнення теорем Кодда-Лакруа-Піротта

Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя, 16600, м. Ніжин, вул. Кропив'янського 2,
e-mail: glushkoim@gmail.com

I.M. Glushko, PhD

Generalization of Codd-Lacroix-Pirotte's theorems

Nizhyn Gogol State University, 16600, Nizhyn, Kropyiv'yanskoho str, 2,
e-mail: glushkoim@gmail.com

У статті представлено результат, який стосується еквівалентності табличної алгебри для нескінченних таблиць і відповідних реляційних числень на кортежах та доменах. При цьому поняття реляції розглядається в термінах іменних множин, а класичне реляційне числення поповнене функціональними та предикатними сигнатурами на універсальному домені.

Ключові слова: реляційні (табличні) бази даних, числення рядків, числення на домені, таблична алгебра.

In article is presented a result which concerns equivalence of table algebra for infinite tables and corresponding relational calculi. This result generalizes the classical result about the equivalence of Codd's relational algebra and tuple (domain) calculus. Concept of table (relation) is considered in terms of nominal sets. Specifying of table in terms of nominal sets is carried out by V. Redko, J. Brona, D. Buy, S. Poliakov. Traditionally the finite set of tuple is understood under the table and the authors take it into account. However, as a rule, mathematical statements about standard properties of specification of relation operations remain true for infinite relations. Further under relation we will understand any set of tuples (with common scheme), in particular infinite. Furthermore we consider only one universal domain. The classical relational calculi are filled up by functional and predicate signatures on the universal domain (while usually consider only binary predicates and functional signature is generally empty).

Key words: relation databases, tuple calculus, domain calculus, table algebra.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Буй Д.Б.

Вступ

Системи управління базами даних (СУБД) в наш час використовуються практично в усіх сферах людської діяльності, які пов'язані зі збереженням та обробкою інформації. Прогрес, досягнутий в області технологій баз даних, в значній мірі базується на реляційній моделі, запропонованій Е. Коддом (E. Codd) у 70-х роках XX ст.. Реляційна алгебра розроблена Е. Коддом у вигляді сукупності операторів над таблицями [1]. Вчений також дав формальне визначення реляційного числення на кортежах та вказав алгоритм перетворення довільного виразу реляційного числення на кортежах на семантично еквівалентний йому алгебраїчний вираз [2].

Трохи пізніше М. Лакруа (M. Lacroix) з А. Піроттом (A. Pirotte) (1977 р.) запропонували альтернативну до числення на кортежах версію числення – реляційне числення зі змінними на доменах [3]. Відмінність полягає у тому, що замість змінних рядків розглядаються змінні значення із домену, які представляють компоненти рядка.

Набір операцій реляційної алгебри, запропонований Е. Коддом, з часом був розширений відповідно до потреб мов запитів. Так, Е. Клуг (A. Klug) [4] (1982 р.) розширив реляційну алгебру та реляційне числення агрегатними функціями, які дозволяють знаходити сумарні, середні, максимальні, мінімальні та інші значення елементів у стовпці таблиці, і показав еквівалентність отриманих при цьому двох формальних мов.

Три основні підходи до конструювання мов запитів, а саме реляційна алгебра, реляційне числення на кортежах та реляційне числення на доменах, розглянуто Дж. Ульманом (J.D. Ullman)

© І.М. Глушко, 2014

(1982) у [5]. Автор обмежує реляційні числення (на кортежах та доменах) для використання тільки скінченних відношень, тобто нескінченні відношення як такі, не розглядаються. При цьому вводяться так звані "безпечні" вирази реляційних числень, що дозволяють працювати лише з таблицями, що мають скінченну кількість рядків. Доведено еквівалентність реляційної алгебри та числень на кортежах і доменах, в яких розгляд обмежується лише безпечними виразами.

До питання еквівалентності реляційної алгебри та реляційних числень також звертається Д. Мейєр (D. Maier) (1983 р.) [6]. Автор розглядає три системи запитів: реляційне числення кортежів, реляційне числення доменів та табло. Показано, що і числення кортежів, і числення доменів еквівалентні по виразній силі реляційній алгебрі. Для кожного з цих числень представлено дві інтерпретації: необмежену та обмежену, і введено клас "безпечних" виразів, для яких обидві інтерпретації співпадають. При доведенні того, що числення кортежів при необмеженій інтерпретації еквівалентне по виразній силі реляційній алгебрі, Д. Мейєр пропонує читачу самостійно довести деякі пункти теореми, а саме для алгебраїчних виразів, які містять операції проекції, об'єднання та різниці, самостійно побудувати відповідні еквівалентні вирази реляційного числення кортежів. Також на самостійне опрацювання залишаються деталі доведення теореми про еквівалентність реляційної алгебри та числення кортежів при обмеженій інтерпретації і леми, в якій говориться про те, що для будь-якого безпечного виразу необмежена та обмежена інтерпретації співпадають. Такі пропуски частин доведень порушують повноту доведення, так як читач не має змоги перевірити правильність своїх міркувань.

Суть реляційного підходу складає поняття реляції. Кодд Е. під реляцією розуміє класичне поняття скінченномісного відношення як підмножини декартового добутку множин, взятих у деякому порядку. Проте таке уточнення має ряд недоліків: інформаційний зміст реляції не залежить від порядку слідування компонент, що для відношення є суттєвим; використання стандартних імен 1, 2, … для доступу до компонент елементів реляції є обтяжливим, тому в монографії [7] були зроблені спроби розширення інтерпретацій реляцій. Редько В.Н. , Брона Ю.Й. ,Буй Д.Б., Поляков С.А. здійснили уточнення реляції в термінах іменних множин [7]. При такому уточненні розглядається один універсальний домен, що дозволяє дослідити загальні властивості табличних маніпуляцій, не вводячи до розгляду несуттєві деталі, та спростити міркування. Традиційно під реляцією розуміється скінченна множина рядків, проте, як правило, математичні твердження про стандартні властивості уточнень реляційних операцій залишаються вірними і для нескінченних реляцій. Так, детальний аналіз доведень у [7] показує, що властивість скінченності таблиць, як правило, не використовується. Тому можна піти далі та розглядати нескінчені реляції. Отже, надалі під реляцією будемо розуміти довільну множину односхемних рядків, зокрема, нескінченну. При такому розгляді постає задача встановлення еквівалентності табличної (реляційної) алгебри та реляційного числення. Вирішення цієї проблеми і пропонується у даній роботі.

Таблична алгебра нескінченних таблиць та узагальнені реляційні числення

Розглянемо дві множини: $\boldsymbol{A}$ – множину атрибутів і $\boldsymbol{D}$ – універсальний домен. Довільну (скінченну) множину атрибутів $R \subseteq \boldsymbol{A}$ назвемо *схемою*. *Рядком схеми* R називається іменна множина на парі R, $\boldsymbol{D}$, проекція якої за першою компонентою рівна R (тобто по суті розглядається функція вигляду $s : R \to \boldsymbol{D}$). Під *таблицею схеми* R розуміємо пару $\langle t, R \rangle$, де t – множина (зокрема, нескінченна) рядків вказаної схеми R. Отже, кожній таблиці приписується певна схема. Це по суті впливає тільки на випадок порожньої таблиці, оскільки за непорожньою таблицею схема відновлюється однозначно. Також внесення схеми в уточнення реляції необхідне при доведенні теорем про еквівалентність табличної алгебри та реляційного числення.

Під *табличною алгеброю нескінченних таблиць* розуміємо алгебру $\langle \boldsymbol{T}, \Omega_{P,\Xi} \rangle$, де $\boldsymbol{T}$ – множина усіх таблиць, $\Omega_{P,\Xi} = \{\bigcup_R, \bigcap_R, \setminus_R, \sigma_{p,R}, \pi_{X,R}, \underset{R_1,R_2}{\otimes}, \div_{R_2}^{R_1}, Rt_{\xi,R}, \sim_R\}$ – сигнатура, $p \in P, \xi \in \Xi$, $X, R, R_1, R_2 \subseteq \boldsymbol{A}$, P, Ξ – множини параметрів.

Означення операцій сигнатури табличної алгебри нескінченних таблиць можна знайти в [8].

Розглянемо узагальнене числення Кодда на кортежах – узагальнене числення рядків (УЧР). Так як у класичних реляційних численнях (Кодда на кортежах та Лакруа-Піротта на доменах), зазвичай, розглядають лише бінарні предикати, а

функціональна сигнатура взагалі порожня, то виникає потреба у поповненні цих числень предикатними та функціональними сигнатурами на універсальному домені, що і зроблено у [8].

Вираз узагальненого числення рядків має вигляд $\{\boldsymbol{x}(R) \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})\}$, де

1) формула $\boldsymbol{P}$ – дозволена;

2) змінна $\boldsymbol{x}$ – єдина змінна, яка входить у формулу $\boldsymbol{P}$ вільно;

3) якщо $scheme(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{P})$ визначена, то $scheme(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{P}) = R$, інакше, $attr(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{P}) \subseteq R$, де $scheme(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{P})$ – це схема рядка $\boldsymbol{x}$ у формулі $\boldsymbol{P}$, $attr(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{P})$ – це множина атрибутів, з якими рядок $\boldsymbol{x}$ зустрічається у формулі $\boldsymbol{P}$.

Дозволеність формули – це вимога погодження схем рядка у підформулах та вимога того, щоб змінна, зв'язана квантором, входила вільно у формулу, яка слідує за квантором.

Реляційне числення зі змінними на доменах відрізняється від числення рядків тим, що замість змінних рядків розглядаються змінні значення із доменів, які представляють компоненти рядка. Оскільки в даній роботі розглядається лише один універсальний домен, то будемо говорити про узагальнене числення на домені (УЧД).

Вираз числення на домені має вигляд $\{\boldsymbol{x}_1^{A_1}, ..., \boldsymbol{x}_n^{A_n} \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}_1^{A_1}, ..., \boldsymbol{x}_n^{A_n})\}$, де

1) формула $\boldsymbol{P}$ – дозволена, а $\boldsymbol{x}_1^{A_1}, ..., \boldsymbol{x}_n^{A_n}$ – всі вільні змінні, які входять у формулу $\boldsymbol{P}$, причому кожна змінна $\boldsymbol{x}_i^{A_i}$ асоційована з атрибутом A_i, де всі A_i попарно різні, $i = 1, \ldots, n$;

2) $R = \{A_1, ..., A_n\}$ – схема виразу.

Поняття дозволеної формули УЧД визначається аналогічно як і в УЧР.

Еквівалентність табличної алгебри нескінченних таблиць та відповідних числень

Доведення еквівалентності табличної алгебри нескінченних таблиць та відповідних числень проведено наступним чином: спочатку доведемо, що для довільного виразу табличної алгебри нескінченних таблиць можна побудувати еквівалентний вираз УЧР, потім покажемо, що для виразу УЧР можна побудувати еквівалентний вираз УЧД і, нарешті, доведемо, що для будь-якого виразу УЧД можна побудувати еквівалентний вираз табличної алгебри нескінченних таблиць. Вираз УЧР E еквівалентний виразу табличної алгебри нескінченних таблиць F, якщо значення виразу E співпадає із значенням виразу F за умови, що табличні константи і табличні змінні інтерпретуються однаково в цих двох виразах.

Теорема 1. Якщо F – вираз табличної алгебри нескінченних таблиць, то можна ефективно побудувати еквівалентний йому вираз E узагальненого числення рядків.

Доведення. При доведенні теореми розглядаємо вирази табличної алгебри нескінчених таблиць, які містять тільки операції об'єднання, різниці, селекції, проекції, з'єднання та перейменування, оскільки операції перетину, ділення та активного доповнення можна виразити через вказані операції [8]. Доведення проведемо індукцією за числом операцій в F.

База індукції (немає операцій). Можливі два випадки. По-перше, $F = \langle t, R \rangle$ – стала таблиця, де t – нескінченна множина рядків схеми R. Покладемо $E = \{\boldsymbol{x}(R) \mid t_R(\boldsymbol{x})\}$. По-друге, $F = \langle X, R \rangle$ – змінна таблиця. У даному випадку покладемо $E = \{\boldsymbol{x}(R) \mid X_R(\boldsymbol{x})\}$.

Крок індукції. Припустимо, що твердження теореми виконується для будь-якого виразу табличної алгебри нескінченних таблиць, який містить менше $k = 1, 2, 3...$ операцій. Нехай вираз F містить k операцій.

1. $F = F_1 \bigcup_R F_2$. Тоді вирази F_1 і F_2 мають менше k операцій, тому існують, згідно індуктивного припущення, вирази УЧР $\{\boldsymbol{x}(R) \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})\}$ і $\{\boldsymbol{x}(R) \mid \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{x})\}$, еквівалентні виразам F_1 і F_2 відповідно. Покладемо $E = \{\boldsymbol{x}(R) \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}) \vee \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{x})\}$.

2. $F = F_1 \setminus_R F_2$. Тоді, як і у випадку 1, існують вирази УЧР $\{\boldsymbol{x}(R) \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})\}$ і $\{\boldsymbol{x}(R) \mid \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{x})\}$, еквівалентні виразам F_1 і F_2 відповідно. Покладемо $E = \{\boldsymbol{x}(R) \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}) \wedge \neg \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{x})\}$.

3. $F = \sigma_{\tilde{p}, R}(F_1)$. Нехай $\{\boldsymbol{x}(R) \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})\}$ – вираз УЧР, еквівалентний виразу F_1. Покладемо $E = \{\boldsymbol{x}(R) \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}) \wedge \boldsymbol{p}(\boldsymbol{x}(A_1), ..., \boldsymbol{x}(A_m))\}$, де $R = \{A_1, ..., A_m\}$ схема таблиці, яка є значенням виразу F_1. Тут припускається, що предикат-параметр селекції заданий так: $\tilde{p}(s) = true \Leftrightarrow \boldsymbol{p}(s(A_1), ..., s(A_m)) = true$, $s \in S(R)$, де $\boldsymbol{p}$ – m-арний сигнатурний предикатний символ.

4. $F = \pi_{X, R}(F_1)$. Нехай $\{\boldsymbol{x}(R) \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})\}$ – вираз УЧР, еквівалентний виразу F_1. Покладемо $E = \{\boldsymbol{y}(X \cap R) \mid \exists \boldsymbol{x}(R)(\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}) \wedge \bigwedge_{A \in X \cap R} \boldsymbol{y}(A) = \boldsymbol{x}(A))\}$.

Особливий випадок: якщо $X \bigcap R = \varnothing$, то $E = \{\boldsymbol{y}(\varnothing) \mid \exists \boldsymbol{x}(R)\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})\}$.

5. $F = F_1 \underset{R_1,R_2}{\otimes} F_2$. Нехай $\{\boldsymbol{x}(R_1) \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})\}$ і $\{\boldsymbol{y}(R_2) \mid \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{y})\}$ – вирази УЧР, еквівалентні виразам F_1 та F_2 відповідно. Покладемо $E = \{\boldsymbol{z}(R_1 \bigcup R_2) \mid \exists \boldsymbol{x}(R_1)\exists \boldsymbol{y}(R_2)(\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}) \wedge \wedge \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{y}) \wedge \underset{A \in R_1}{\wedge} \boldsymbol{z}(A) = \boldsymbol{x}(A) \wedge \underset{A \in R_2}{\wedge} \boldsymbol{z}(A) = \boldsymbol{y}(A))\}$.

6. $F = Rt_{\xi,R}(F_1)$, де $\xi : \boldsymbol{A} \xrightarrow{\sim} \boldsymbol{A}$ – ін'єктивна (взагалі кажучи, часткова) функція, що здійснює перейменування атрибутів. Тоді, згідно індуктивного припущення, існує вираз УЧР $\{\boldsymbol{x}(R) \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})\}$, еквівалентний виразу F_1. Покладемо $E = \{\boldsymbol{y}(R_2) \mid \exists \boldsymbol{x}(R)(\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}) \wedge \underset{C \in R \setminus dom\xi}{\wedge} \boldsymbol{y}(C) = \boldsymbol{x}(C) \wedge \underset{A \in R \cap dom\xi}{\wedge} \boldsymbol{x}(A) = \boldsymbol{y}(\xi(A)))\}$, де $R_2 = (R \setminus dom\xi) \bigcup \xi[R]$ (зауважимо, що це схема перейменованої таблиці).

Теорема 1 встановлює, що УЧР не менш виразне, ніж таблична алгебра нескінченних таблиць (використовуючи термінологію [6]).

Покажемо, що для виразу УЧР можна побудувати еквівалентний вираз УЧД. Задамо відображення $\varphi : E \to H$, яке кожному виразу УЧР E ставить у відповідність еквівалентний вираз УЧД H.

Нехай $E = \{\boldsymbol{y}(R) \mid P(\boldsymbol{y})\}$ – вираз УЧР, змінна $\boldsymbol{y}$ – єдина змінна, яка входить у формулу $\boldsymbol{P}$ вільно, а $R = \{A_1,...,A_n\}$. Використовуємо $\boldsymbol{y}$ як синтаксичну змінну, областю зміни якої є змінні УЧР. Застосуємо спочатку відображення φ до термів УЧР:

1) кожну предметну константу $\boldsymbol{d}$ УЧР замінимо на константу $\boldsymbol{d}^A$ УЧД, де $A \in R$ – атрибут асоційований з даною константою;

2) кожен терм $\boldsymbol{x}(A_i)$ УЧР замінимо змінною $\boldsymbol{x}_i^{A_i}$ УЧД;

3) кожен терм УЧР $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{v}_1,...,\boldsymbol{v}_n)$, де $\boldsymbol{v}_i$ – терми УЧР, $i = 1,...,n$, замінимо на терм УЧД $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}_1,...,\boldsymbol{u}_n)$, де $\boldsymbol{u}_j$ – терми УЧД, $j = 1,...,n$, отримані в результаті попередніх замін.

Застосуємо відображення φ до атомів УЧР:

а1) кожен атом $t_{R'}(\boldsymbol{z})$ УЧР замінимо на атом УЧД $t_{R'}(\boldsymbol{z}_1^{A_1},\ldots,\boldsymbol{z}_m^{A_m})$, де $\boldsymbol{z}_1^{A_1},\ldots,\boldsymbol{z}_m^{A_m}$ – змінні УЧД, $R' = \{A_1,...,A_m\}$ – схема сталої таблиці $\langle t, R' \rangle$;

а2) кожен атом $X_{R'}(\boldsymbol{z})$ УЧР замінимо на атом УЧД $X_{R'}(\boldsymbol{z}_1^{A_1},\ldots,\boldsymbol{z}_m^{A_m})$, де $\boldsymbol{z}_1^{A_1},\ldots,\boldsymbol{z}_m^{A_m}$ – змінні УЧД, $R' = \{A_1,...,A_m\}$ – схема змінної таблиці $\langle X, R' \rangle$;

а3) кожен атом УЧР $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{v}_1,...,\boldsymbol{v}_m)$, де $\boldsymbol{v}_i$ – терми УЧР, $i = 1,...,m$, замінимо на атом числення на домені $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{u}_1,...,\boldsymbol{u}_m)$, де $\boldsymbol{u}_j$ – терми УЧД, $j = 1,...,m$, отримані в результаті попередніх замін.

Кожну формулу $\boldsymbol{P}$ УЧР перетворимо на формулу $\boldsymbol{P'}$ УЧД, де формула $\boldsymbol{P'}$ – це формула $\boldsymbol{P}$, у якій для кожного атома виконані заміни а1-а3, а кожна вільна змінна $\boldsymbol{z}$ схеми $R = \{A_1,...,A_n\}$ УЧР замінена n змінними $\boldsymbol{z}_1^{A_1},...,\boldsymbol{z}_n^{A_n}$ УЧД.

- Формулу з квантором УЧР $\exists \boldsymbol{z}(R_2)\boldsymbol{G}$, $R_2 = \{A_1,...,A_m\}$ перетворимо на формулу УЧД вигляду $\exists \boldsymbol{z}_1^{A_1}(A_1)...\exists \boldsymbol{z}_m^{A_m}(A_m)\boldsymbol{G'}$.
- Формулу з квантором УЧР $\forall \boldsymbol{z}(R_2)\boldsymbol{G}$, $R_2 = \{A_1,...,A_m\}$ перетворимо на формулу УЧД вигляду $\forall \boldsymbol{z}_1^{A_1}(A_1)...\forall \boldsymbol{z}_m^{A_m}(A_m)\boldsymbol{G'}$.

Виконавши вказані заміни, отримаємо вираз УЧД $H = \{\boldsymbol{y}_1^{A_1},...,\boldsymbol{y}_n^{A_n} \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{y}_1^{A_1},...,\boldsymbol{y}_n^{A_n})\}$. В результаті проведених замін очевидно, що кожна змінна $\boldsymbol{z}_i^{A_i}$ УЧД може приймати точно ті самі значення, що і $\boldsymbol{z}(A_i)$. Отже, значення виразу H співпадає із значенням виразу E. Тому має місце наступна теорема.

Теорема 2. Якщо E – вираз узагальненого числення рядків, то можна ефективно побудувати еквівалентний йому вираз H узагальненого числення на домені.

Таким чином, УЧД є не менш виразним, ніж УЧР.

Теорема 3. Для кожного виразу узагальненого числення на домені H можна ефективно побудувати еквівалентний йому вираз F табличної алгебри нескінченних таблиць.

Доведення. Нехай $H = \{\boldsymbol{x}_1^{A_1},...,\boldsymbol{x}_n^{A_n} \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}_1^{A_1},...,\boldsymbol{x}_n^{A_n})\}$ – вираз УЧД, значенням якого є таблиця схеми $R = \{A_1,...,A_n\}$. Побудуємо для кожної підформули $\boldsymbol{G}$ формули $\boldsymbol{P}$ еквівалентний табличний вираз F_G.

Доведемо індукцією по числу операторів у підформулі $\boldsymbol{G}$ з $\boldsymbol{P}$, що якщо $\boldsymbol{G}$ містить вільні змінні на універсальному домені $\boldsymbol{y}_1^{A_1},...,\boldsymbol{y}_m^{A_m}$, то для виразу $\{\boldsymbol{y}_1^{A_1},...,\boldsymbol{y}_m^{A_m} \mid \boldsymbol{G}(\boldsymbol{y}_1^{A_1},...,\boldsymbol{y}_m^{A_m})\}$ існує

еквівалентний вираз табличної алгебри F_G. Тоді, якщо $\boldsymbol{G}$ є сама $\boldsymbol{P}$, отримаємо табличний вираз для $\{\boldsymbol{x}_1^{A_1},...,\boldsymbol{x}_n^{A_n} \mid \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}_1^{A_1},...,\boldsymbol{x}_n^{A_n})\}$. Припускається, що $\boldsymbol{y}_1^{A_1},...,\boldsymbol{y}_m^{A_m}$ – всі вільні змінні в $\boldsymbol{G}$, і значенням виразу $\{\boldsymbol{y}_1^{A_1},...,\boldsymbol{y}_m^{A_m} \mid \boldsymbol{G}(\boldsymbol{y}_1^{A_1},...,\boldsymbol{y}_m^{A_m})\}$ є таблиця схеми $R_G = \{A_1,...,A_m\}$.

Замінимо змінні у формулі $\boldsymbol{P}$ таким чином, щоб жодна змінна не входила одночасно і вільно, і зв'язано у $\boldsymbol{P}$ та не була зв'язана квантором у двох різних місцях. Тепер кожна змінна асоційована з атрибутом, який або входить у квантор $\forall \boldsymbol{x}^A(A)$ чи $\exists \boldsymbol{x}^A(A)$, якщо змінна зв'язана у формулі $\boldsymbol{P}$, або, якщо змінна вільна в $\boldsymbol{P}$, співставленим змінній $\boldsymbol{x}_i^{A_i}$, що знаходиться у виразі H зліва від вертикальної лінії (тобто в останньому випадку асоційований атрибут – це атрибут, співставлений змінній $\boldsymbol{x}_i^{A_i}$). Будь-якому атрибуту A співставимо константну таблицю $[\boldsymbol{D}]_A$ схеми $\{A\}$. Значенням цієї таблиці є одноатрибутна таблиця $\langle t, \{A\}\rangle$, яка містить всі рядки $s = \{\langle A, d\rangle\}$, де $d \in \boldsymbol{D}$ – довільний елемент множини $\boldsymbol{D}$.

База індукції (немає операторів, тобто логічних зв'язок і кванторів). Підформула $\boldsymbol{G}$ – атом вигляду $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{u}_1,...,\boldsymbol{u}_m)$, або $t_R(\boldsymbol{a}_1^{A_1},...,\boldsymbol{a}_m^{Am})$, або $X_R(\boldsymbol{z}_1^{A_1},\ldots,\boldsymbol{z}_m^{A_m})$.

1. Нехай $\boldsymbol{G}$ має вигляд $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{u}_1,...,\boldsymbol{u}_m)$, де $\boldsymbol{u}_i$ – терми УЧД, причому $\boldsymbol{y}_1^{A_1},...,\boldsymbol{y}_k^{A_k}$ – всі змінні цих термів, а $A_1,\ldots,A_k$ – атрибути співставлені цим змінним. Покладемо $F_G = \sigma_{\tilde{p},\{A_1,...,A_k\}}\left([\boldsymbol{D}]_{A_1} \underset{R_1,R_2}{\otimes} ... \underset{R_1\cup...\cup R_{k-1},R_k}{\otimes} [\boldsymbol{D}]_{A_k}\right)$, де $R_i = \{A_i\}$, $i = 1,\ldots,k$. Це робиться в припущенні, що предикат-параметр селекції заданий наступним чином $\tilde{p}(s) = true \Leftrightarrow \boldsymbol{p}(s(A_{k_1}),...,s(A_{k_m})) = true$, $s \in S(R)$, де $\boldsymbol{p}$ – m-арний сигнатурний предикатний символ.

2. Нехай $\boldsymbol{G}$ має вигляд $t(\boldsymbol{a}_1^{A_1},...,\boldsymbol{a}_m^{A_m})$, де $\boldsymbol{a}_i^{A_i}$ – константа або змінна на універсальному домені $\boldsymbol{D}$. Нехай $R = \{A_1,...,A_m\}$ – схема сталої таблиці $\langle t, R\rangle$. Покладемо $F_G = \pi_{Y,R}\left(\sigma_{\tilde{p},R}\left(\langle t, R\rangle\right)\right)$, де $\tilde{p}$ – предикат-параметр селекції, який є кон'юнкцією рівностей вигляду $A_i = \boldsymbol{a}_i^{A_i}$ по всіх i, для яких $\boldsymbol{a}_i^{A_i}$ – константа; крім того $Y = \{A_j \mid \boldsymbol{a}_j^{A_j}$ – змінна$\}$.

3. Нехай $\boldsymbol{G}$ має вигляд $X(\boldsymbol{a}_1^{A_1},...,\boldsymbol{a}_m^{A_m})$, де $\boldsymbol{a}_i^{A_i}$ – константа або змінна на універсальному домені $\boldsymbol{D}$. Нехай $R = \{A_1,...,A_m\}$ – схема змінної таблиці $\langle X, R\rangle$. Покладемо $F_G = \pi_{Y,R}\left(\sigma_{\tilde{p},R}\left(\langle X, R\rangle\right)\right)$, де $\tilde{p}$ – предикат-параметр селекції, який є кон'юнкцією рівностей вигляду $A_i = \boldsymbol{a}_i^{A_i}$ по всіх i, для яких $\boldsymbol{a}_i^{A_i}$ – константа; крім того $Y = \{A_j \mid \boldsymbol{a}_j^{A_j}$ – змінна$\}$.

Крок індукції. Припустимо, що підформула $\boldsymbol{G}$ містить принаймні один оператор і що гіпотеза індукції справедлива для всіх підформул формули $\boldsymbol{P}$, що мають менше операторів, ніж $\boldsymbol{G}$.

1. $\boldsymbol{G} = \neg\boldsymbol{Q}$. Нехай F_Q – табличний вираз для $\boldsymbol{Q}$, а значенням виразу F_Q є таблиця схеми R_Q. Покладемо $F_G = {\sim}_{R_Q} F_Q$.

2. $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{Q} \vee \boldsymbol{Q}'$. Нехай вільні змінні з $\boldsymbol{Q}$ – це $z_1^{B_1},...,z_k^{B_k},v_1^{C_1},...,v_p^{C_p}$, а з $\boldsymbol{Q}'$ – це $z_1^{B_1},...,z_k^{B_k},w_1^{K_1},...,w_q^{K_q}$, де змінні $v_1^{C_1},...,v_p^{C_p}$ та $w_1^{K_1},...,w_q^{K_q}$ попарно не співпадають. Змістовно кажучи, $z_1^{B_1},...,z_k^{B_k}$ – всі спільні змінні виразів $\boldsymbol{Q}$ та $\boldsymbol{Q}'$. Нехай F_Q та $F_{Q'}$ – табличні вирази для $\boldsymbol{Q}$ і $\boldsymbol{Q}'$ відповідно, причому C_i, $i = 1,...,p$ – атрибути, асоційовані зі змінними $v_1^{C_1},...,v_p^{C_p}$, а K_j, $j = 1,...,q$ – атрибути асоційовані із змінними $w_1^{K_1},...,w_q^{K_q}$. Покладемо $F_1 = F_Q \underset{R_Q,\{K_1\}}{\otimes} [\boldsymbol{D}]_{K_1} \underset{R_Q\cup\{K_1\},\{K_2\}}{\otimes} ... \underset{R_Q\cup\{K_1,...,K_{q-1}\},\{K_q\}}{\otimes} [\boldsymbol{D}]_{K_q}$, а $F_2 = F_{Q'} \underset{R_{Q'},\{C_1\}}{\otimes} [\boldsymbol{D}]'_{C_1} \underset{R_{Q'}\cup\{C_1\},\{C_2\}}{\otimes} ... \underset{R_{Q'}\cup\{C_1,...,C_{p-1}\},\{C_p\}}{\otimes} [\boldsymbol{D}]'_{C_p}$, де R_Q та $R_{Q'}$ – схеми таблиць, які є значеннями табличних виразів F_Q та $F_{Q'}$ відповідно. Позначимо через R_{F_1} та R_{F_2} – схеми таблиць, які є значеннями табличних виразів F_1 та F_2 відповідно. За побудовою виразів F_1 та F_2 їхні схеми R_{F_1} та R_{F_2} рівні. Тому покладемо $F_G = F_1 \cup_{R_{F_1}} F_2$.

3. $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{Q} \wedge \boldsymbol{Q}'$. Даний вираз УЧД можна виразити через операції заперечення та

диз'юнкції. За законом де Моргана $\boldsymbol{G} = \neg(\neg\boldsymbol{Q} \vee \neg\boldsymbol{Q}')$.

4. $\boldsymbol{G} = \exists \boldsymbol{x}^A(A)\boldsymbol{Q}$. Нехай F_Q – табличний вираз для $\boldsymbol{Q}$. Покладемо F_G рівним $\pi_{X\setminus\{A\},X}(F_Q)$, де X – схема таблиці, яка є значенням табличного виразу F_Q.

5. $\boldsymbol{G} = \forall \boldsymbol{x}^A(A)\boldsymbol{Q}$. Даний вираз УЧД можна виразити через операцію заперечення та квантор існування $\forall \boldsymbol{x}^A(A)\boldsymbol{Q} = \neg(\exists \boldsymbol{x}^A(A)(\neg\boldsymbol{Q}))$.

Отже, доведено, що таблична алгебра нескінченних таблиць є не менш виразною, ніж УЧД.

Враховуючи теореми 1, 2 та 3, встановлено основний результат.

Теорема 4. Таблична алгебра нескінченних таблиць, узагальнене числення рядків і узагальнене числення на домені еквівалентні.

Висновки

У статті подано огляд літератури з питання еквівалентності реляційної алгебри, числення на кортежах та числення на доменах. Запропоновано узагальнення теорем Кодда-Лакруа-Піротта для випадку нескінченних таблиць. При цьому можна піти далі, обмежуючи розгляд лише скінченними таблицями, та показати еквівалентність отриманих при цьому формалізмів.

.

Список використаних джерел

1. *Codd E.F.* A Relational Model of Data for Large Shared Data Banks / E.F. Codd // Comm. of ACM. – 1970.– 13, № 6. – P. 377-387.
2. *Codd E.F.* Relational Completeness of Data Base Sublanguages / E.F. Codd // Data Base Systems. – New York: Prentice-Hall. – 1972. – P. 65-93.
3. *Lacroix M.* Domain-oriented Relational Languages / M. Lacroix, A. Pirotte // Proc. 3rd Int. Conf. on Very Large Data Bases. – Tokyo, October, 1977. – P. 370-378.
4. *Klug A.* Equivalence of Relational Algebra and Relational Calculus Query Languages Having Aggregate Functions / A. Klug // J. ACM 29. – July 1982. – № 3. – P. 699-717.
5. *Ullman J.D.* Principles of database systems / J.D. Ullman. – Rockville, Maryland: Computer Science Press, 1982. – 484 p.
6. *Maier D.* The theory of relational databases / D. Maier. – Rockville, Maryland: Computer Science Press, 1983. – 637 p.
7. Реляційні бази даних: табличні алгебри та SQL-подібні мови / В.Н. Редько, Ю.Й. Брона, Д.Б. Буй, С.А. Поляков. – Київ: Видавничий дім «Академперіодика», 2001. – 198 с
8. *Глушко І.М.* Числення та розширення сигнатур табличних алгебр: дис. … кандидата фіз.-мат. наук: 01.05.01 / І.М. Глушко. – К., 2012. – 142с.

References

1. CODD, E.F. (1970) A Relational Model of Data for Large Shared Data Banks. *Comm. of ACM*. 13(6). pp. 377-387.
2. CODD, E.F. (1972) Relational Completeness of Data Base Sublanguages. *Data Base Systems*. New York: Prentice-Hall. pp. 65-93.
3. LACROIX, M. and PIROTTE, A. (1977) Domain-oriented Relational Languages. In *3rd Int. Conf. on Very Large Data Bases*. Tokyo, 6-8 October. Tokyo: IEEE Computer Society. pp. 370-378.
4. KLUG, A. (1982) Equivalence of Relational Algebra and Relational Calculus Query Languages Having Aggregate Functions *J. ACM*. 29(3). pp. 699-717.
5. ULLMAN, J.D. (1982) Principles of database systems. Rockville, Maryland: Computer Science Press.
6. MAIER, D. (1983) The theory of relational databases. Rockville, Maryland: Computer Science Press.
7. REDKO, V.N., BRONA, YU.J., BUY, D.B. AND POLIAKOV, S.A. (2001) Reliatsiini bazy danykh: tablychni alhebry ta SQL-podibni movy. Kyiv: Vydavnychyi dim «Akademperiodyka».
8. GLUSHKO, I.M. (2012) Chyslennia ta rozshyrennia sygnatur tablychnykh algebr. A Thesis for the Degree of kandydat fizyko-matematychnykh nauk. Kyiv: Kyivskyi natsionalnyi universytet imeni Tarasa Shevchenka.

Надійшла до редколегії 11.08.2014

УДК 519.9

Даниленко Д. А.[1], студент.

Оптимізація еліптичних кривих

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: ozar1024@gmail.com

D. Danylenko[1], student.

Optimization of elliptic curves

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: ozar1024@gmail.com

У статті представлені результати реалізації класичних алгоритмів обчислень, арифметики Монтгомері і Катацуби в реалізації ГОСТ Р 34.10-2012 на основі еліптичних кривих. Мета даної роботи – підрахунок кількості операцій кожної дії для подальшого порівняння. Арифметика Монтгомері не вигідна, якщо використовується тільки додавання і множення. Операції Карацуби виграшні лише при достатньо довгих числах.

Ключові слова: еліптичні криві, арифметика Монтгомері, алгоритм Карацуби.

Existing algorithms that underlie modern cryptography may be at risk due to the progress of solving mathematical problems. The software must be easily updated, allowing to keep in touch with mathematical progress and technical achievements in the industry. As a solution to all problems is proposed cryptography based on elliptic curves over finite fields. Methods elliptical cryptographic techniques similar to other asymmetric algorithms: The assumption of the complexity of the mathematical problem, in this case - the discrete logarithm in the group of points of elliptic curves. Unlike similar assignments integer factorization and discrete logarithms, positive results in one of them threatened elliptical cryptography.The article presents the results of the classical computational algorithms, Montgomery reduction and Katatsuby algorithm in the implementation of GOST R 34.10-2012 based on elliptic curves. The aim of this work - counting the number of operations of each action for future comparison. Montgomery arithmetic is not profitable only for addition and multiplication. Karatsuba algorithm wins only at sufficiently long numbers.

Key Words: Elliptic curves, Montgomery reduction, Karatsuba algorithm.

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Анісімов А. В.

У Лас-Вегасі на конференції Black Hat з особливою заявою виступили четверо дослідників кібербезпеки: Алекс Стеймос, Том Ріттер , Томас Птачек і Джавед Семюель. Існуючі алгоритми, що лежать в основі сучасної криптографії, можуть перебувати в небезпеці у зв'язку з прогресом вирішення математичних завдань.

Загальновідомо, що в основі асиметричної криптографії лежить два ключа: один може зашифрувати дані, інший використовується для їх розшифрування. Передбачається, що деякі математичні операції важкі і можуть бути виконані лише за експоненціальний час. Однак, існування таких функцій, тобто властивість експоненціального зростання складності, так і залишається недоведеною гіпотезою.

Найбільш поширені асиметричні алгоритми – алгоритм Діффі-Хеллмана, RSA, DSA – покладаються на складність двох завдань: факторизації цілих чисел і дискретного логарифмування. Але були отримані швидкі алгоритми дискретного логарифмування, що мають обмежене застосування. На даний момент не існує відомих способів використання цих напрацювань у практичній криптографії, але навіть ці математичні досягнення лякають

© Д. А. Даниленко, 2014

криптографів. Дослідники проводили аналогії з атаками на SSL виду BEAST, CRIME і BREACH. Використані для цих атак особливості асиметричної криптографії довгі роки вважалися суто теоретичними і не мають практичного застосування, але все виявилось інакше.

Під загрозою будуть оновлення з новими методами криптографії для операційних систем і прикладного ПО: оскільки програми спираються на цифрові підписи, швидко з'являться підроблені пакети оновлень.

В якості вирішення всіх проблем пропонується криптографія на основі еліптичних кривих над скінченними полями. Методи еліптичної криптографії схожі з методами інших асиметричних алгоритмів: є припущення про складність математичної задачі, в даному випадку – дискретного логарифмування в групах точок еліптичних кривих. На відміну від подібних завдань факторизації цілих чисел і дискретного логарифмування, позитивні результати в одній з них не загрожують еліптичній криптографії.

Еліптична крива – безліч точок (x, y), що задовольняють рівняння $y^2 + a_1xy + a_3 = x^3 + a_2x^2 + a_4x + a_6$.

Це рівняння може розглядатися над довільними полями і, зокрема, над кінцевими полями, що представляють для криптографії особливий інтерес.

У криптографії еліптичні криві розглядаються над двома типами кінцевих полів: простими полями непарної характеристики ($Z_p, p > 3$ – просте число) і полями характеристики 2.

Слід зазначити, що в Z_p у кожного ненульового елемента є або два квадратних кореня, або немає жодного, тому точки еліптичної кривої розбиваються на пари вигляду (x, y) і $(x, -y)$.

Для використання еліптичної криптографії всі учасники повинні узгодити всі параметри, що визначають еліптичну криву, тобто набір параметрів криптографічного протоколу. Еліптична крива визначається константами a і b.

Для знаходження кривої для набору параметрів використовуються два методи:

•Вибрати випадкову криву, потім скористатися алгоритмом підрахунку точок.

•Вибрати точки, після чого побудувати криву по них, використовуючи техніку множення.

Існує декілька класів криптографічно «слабких» кривих, яких слід уникати:

• Криві над F_{2^m}, де m – не просте число. Шифрування схильне до атак Вейля.

• Криві з $|E(F_q)| = q$ вразливі для атаки, яка відображає точки даної кривої в адитивну групу поля F_q.

Для обчислення суми пари точок на еліптичній кривій потрібно не тільки кілька операцій додавання і множення в F_q, а й операція звернення, тобто для заданого $x \in F_q$ знаходження такого $y \in F_q$, що $xy = 1$, яка на один-два порядки повільніше, ніж множення.

У зв'язку з цим був реалізований ГОСТ Р 34.10-2012 та спроба пришвидшення його роботи з допомогою арифметики Монтгомері і Карацуби. Це дало змогу порівняти ефективність алгоритмів при різних обставинах з класичними алгоритмами обчислень.

Особливість арифметики Монтгомері дозволяє уникати повільної операції ділення. Для його виконання ми шукаємо обернений елемент (який займає більшу половину часу) та додаткову редукцію. Ділень стає менше, але додавань і множень врази більше, що не є вигідно (Рис. 1-4). Оскільки для операцій в даній системі потрібно спочатку робити редукцію, а потім обернену редукцію, то це не ефективно, якщо використовується тільки додавання і множення.

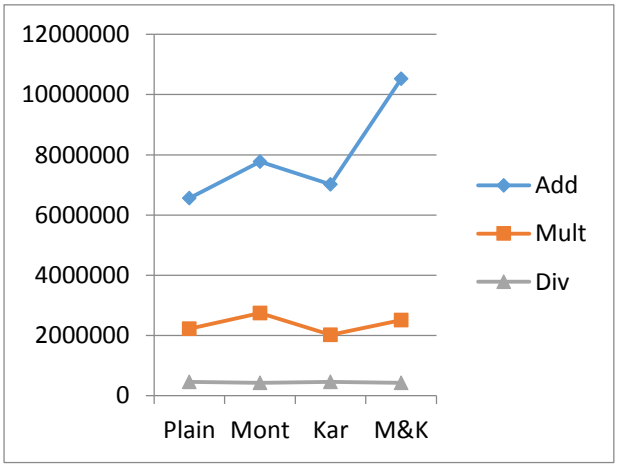


Рис. 1 Довжина слова 20

Арифметика Карацуби орієнтована на пришвидшення операції множення. Результати показують, що даний алгоритм стає невигідним зі зменшенням кількості слів у порядку кривої. Наприклад для довжини слова 5: множень стає менше на 5000, кількість додавань збільшується на 75000 (Рис. 4). А для довжини 20: множень менше на 200000, додавань більше на 500000 (Рис. 1). З цього можна зробити висновок, що чим довші числа, тим більша перевага використання алгоритму Карацуби.

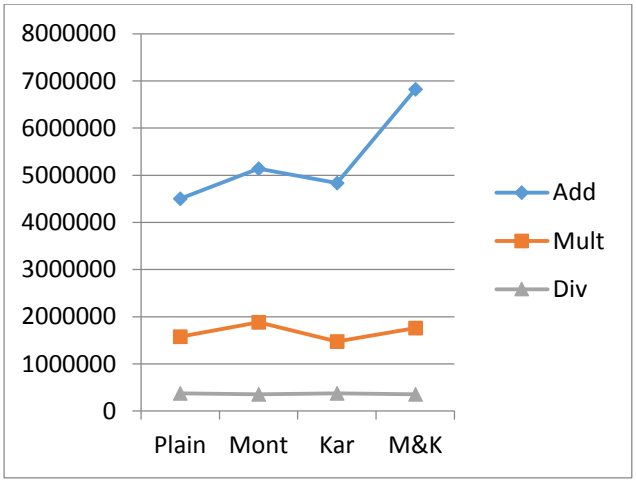


Рис. 2 Довжина слова 15

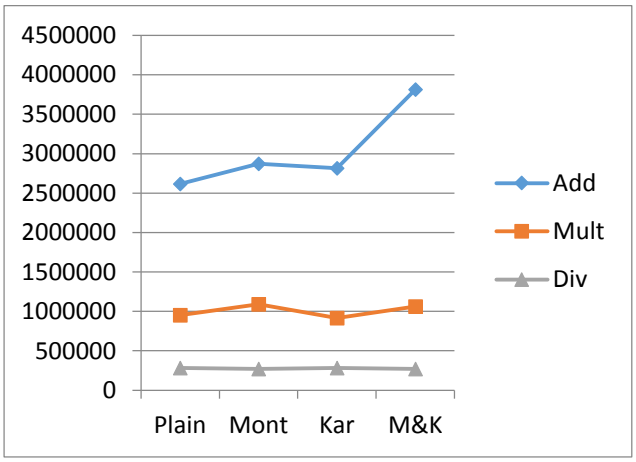


Рис. 3 Довжина слова 10

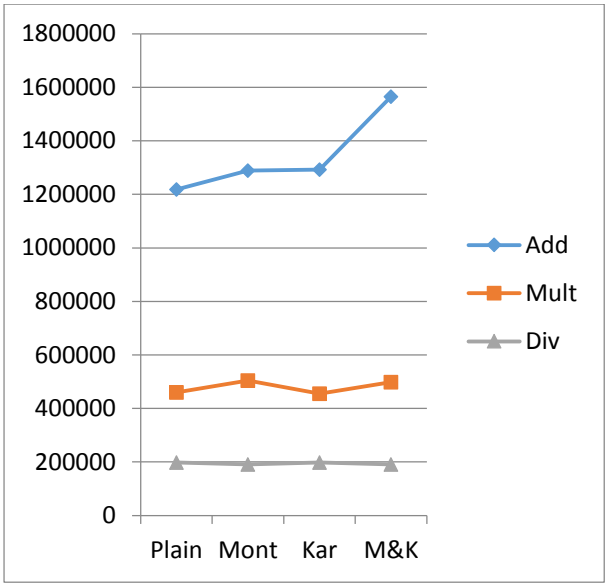


Рис. 4 Довжина слова 5

У загальному і цілому дослідники закликають індустрію інформаційних технологій почати підтримувати еліптичну криптографію вже сьогодні, а також упевнитися в захищеності систем: вони не повинні покладатися на застарілі алгоритми та протоколи. Програмне забезпечення повинно бути легко оновлюваним, дозволяючи тримати зв'язок з математичним прогресом і технічними досягненнями галузі. Криптоапокаліпсіс може і не статися, але готовність до нього обов'язкова вже зараз.

Список використаних джерел

1. *Шнайер Б.* Прикладная криптография. Протоколы, алгоритмы, исходные тексты на языке Си. / М.: ТРИУМФ, 2002 – 816 с.
2. *Семёнов Г.* Цифровая подпись. Эллиптические кривые / «Открытые системы» № 7-8/2002 – 9 с.
3. A. Menezes, P. van Oorschot, S. Vanstone. Chapter 14. Efficient Implementation / Handbook of Applied Cryptography. — CRC-Press, 1996. — p. 816.
4. Cetin K. Koc, Tolga Acar, Analyzing and Comparing Montgomery Multiplication Algorithms / IEEE Micro,1996. pp. 26–33.
5. *Кнут Д.* Искусство программирования. (3-е изд.) / М.: Вильямс, 2007. — 832 с.

References

1. SCHNEIER B.(1994) *Applied Cryptography*/ ISBN John Wiley & Sons, p. 816.
2. SEMENOV G. (2002) *Digital signature. Elliptic curves* / ISBN "Open Systems» № 7, p. 9.
3. MENEZES A., VAN OORSCHOT P., VANSTONE S. (1996) *Chapter 14. Efficient Implementation* / Handbook of Applied Cryptography. — CRC-Press, p. 816.
4. CETIN K. KOC, TOLGA ACAR (1996) *Analyzing and Comparing Montgomery Multiplication Algorithms* / IEEE Micro p. 26-33.
5. KNUTH D. (2007) *The Art of Computer Programming (3rd ed.)* / ISBN Addison-Wesley Professional, p. 832.

Надійшла до редколегії 25.07.14

УДК 004.93

Донченко В.С.[1], д.ф.м.-н., професор,
Скотаренко Ф.М.[2], аспірант

Кортежні оператори в задачі групування інформації: лінійна дискримінація матричних ‘векторів ознак’

[1-2] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр.-т Глушкова 4д,

e-mail: voldon@bigmir.net
e-mail: fred.unicyb@gmail.com

V.S. Donchenko[1], D. Sci., Professor,
F.M. Skotarenko[2], postgraduate student

Cortege Operators in Grouping Information Problem: Linear Discrimination of Matrix ‘Feature Vectors’

[1-2] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova av., 4d,

e-mail: voldon@bigmir.net
e-mail: fred.unicyb@gmail.com

У роботі досліджена задача лінійної дискримінації як один з варіантів задачі групування інформації(ЗГІ), що є принциповою у прикладних дослідженнях. Вона може поставати в одному з варіантів: як задача відновлення функції, представленої своїми спостереженнями, чи – у вигляді задачі класифікації, кластеризації, розпізнавання образів. Задача лінійної дискримінації (ЛД-задача) двох класів є важливим представником останнього варіанту ЗГІ. На відміну від класичного варіанту, ЛД-задача розглядається для елементів евклідового простору матриць фіксованої розмірності. Важливість такої постановки задачі визначається тим, що в багатьох важливих прикладних задачах природнім представником об’єктів, що піддаються групуванню, виступають матриці, як це має місце в обробці зображень та для спектрограм в обробці аудіо сигналів. Постановка та розв’язання ЛД - задачі базується на використанні спеціального класу лінійних операторів: так званих кортежних, введених в одній з попередніх робіт авторів([Донченко, Зінько, Скотаренко, 2012]). В роботі наведені необхідні факти з теорії кортежних операторів, необхідні для визначення SVD - подання та конструкцій на його основі: псевдо обернення за Муром- Пенроузом та основних ортогональних проекторів. Важливо, що SVD - розклад та всі побудови на його основі для кортежних операторів зводяться до задачі на власні значення для звичайних матриць.

Ключові слова: вектор-функція, кортежні оператори, лінійна дискримінація.

In this paper, the Problem of a Linear Discrimination (LD-problem) as a variant of the problem of grouping information (GIP). GIP is the principal constituent of applied research and appears in one of the manifestations: as a problem of recovering function, represented by its his observations or - in the form of classification, clusterization, pattern recognition problem. LD-problem of two classes is an important variant of the classification, clasterization, pattern recognition problem version of GIP. In the paper LD-problem is formulated and considered for elements of Matrices Euclidean spaces. The importance of such variant of LD-problem defined by the fact, that in many important applied problems just the matrixes represent the grouping objects. Just the matrixes are the images or spectrograms in audio signals processing. Formulation and solution of linear discrimination based on the use of a special class of linear operators introduced by the authors in [1] - cortege operators. In the work proposed also necessary facts from the theory cortege operators are represented. Namely, these are SVD for cortege operators and correspondent constructions on its base: Moore-Penrose pseudo inverse and base orthogonal projection operators. Note, that SVD for cortege operators is reduced to SVD for ordinary matrixes.

Key Words: Feature vectors, matrix corteges operators, linear discrimination.

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

©В.С Донченко, Ф.М Скотаренко, 2014

1 Cortege operators

By "cortege operator" (CoOp) [Donchenko, Zinko, Skotarenko, 2012] we denote the linear operator $\wp_\alpha : R^K \to R^{m\times n}$, determined by the relation:

$$\wp_\alpha y = \sum_{k=1}^{K} y_k A_k, \alpha = (A_1 \vdots \ldots \vdots A_K) \in R^{(m\times n),K}, y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \cdots \\ y_K \end{pmatrix} \in R^K,$$

where $\alpha = (A_1 \vdots \ldots \vdots A_K)$ - matrix cortege.

Next theorem reduces the SVD for CoOp to SVD for ordinary matrixes.

Theorem 1. The composition of two operators $\wp_\alpha^* \wp_\alpha : R^K \to R^K$ is a linear operator, defined by ordinary matrix F:

$$\wp_\alpha^* \wp_\alpha = \begin{pmatrix} trA_1^T A_1, \ldots, trA_1^T A_K \\ \cdots \\ trA_K^T A_1, \ldots, trA_K^T A_K \end{pmatrix} = F$$

with non-zero singularities $(v_i, \lambda_i^2),\ i = \overline{1,r},\ r = rankF, \lambda_1^2 \geq \cdots \geq \lambda_r^2 > 0.$

Theorem 2. Ortogonal projection operator $Z(\wp_\alpha)$ on the kernel of $\wp_\alpha$ is determined by the equality

$$Z(\wp_\alpha) y = y^T (E_K - \sum_{k=1}^{r} v_k v_k^T) y, y \in R^K.$$

Theorem 3. Moore - Penrose pseudo inverse for $\wp_\alpha$ is the operator of the next form,

$$\wp_\alpha^+ X = \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{\lambda_i} v_k (U_k, X), \mathrm{X} \in \mathrm{R}^{m\times n}$$

where $U_i = \frac{1}{\lambda_i} \wp_\alpha v_i, i = \overline{1,r}.$

The results given above essentially use an abstract SVD theorem

Theorem 4. (Enhanced spectral theorem). [1] . For an arbitrary linear operator $A : E_1 \to E_2$ between a pair of Euclidean spaces the collection of singularities $(v_i, \lambda_i^2),\ (u_i, \lambda_i^2), \lambda_i^2 > 0, i = \overline{1,r},\ r = rankA$ exists for the operators $A^*A : E_1 \to E_1,\ AA^* : E_2 \to E_2$ correspondingly, with a common for both operators collection of eigen values $\lambda_i^2, i = \overline{1,r} :\ \lambda_{i-1} \geq \lambda_i > 0,\ \overline{i = 2,r}$ such that

$$Ax = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i u_i (v_i, x)_1, \quad A^* y = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i v_i (u_i, y)_2.$$

Besides, the following relations take place: $u_i = \lambda_i^{-1} A v_i, i = \overline{1,r}$, $v_i = \lambda_i^{-1} A^* u_i, i = \overline{1,r}$, A^*-conjugate for A.

2 Linear discrimination problem in matrix Euclidean space

Linear discrimination problem (LDP) is the problem of separating of two classes, represented by correspond learning sample by appropriate hyper plane, For Euclidean spaces R^m this problem was formulated and successfully solved on the base of PdI technique in [Kirichenko, Lepeha, 2002]. This problem is formulated and solved below on base of PdI technique developed for matrices on the base of cortege operators represented early in this article.

2.1 The wording of the problem

Let $X_1, \ldots, X_K \in R^{\mathrm{m}\times n}$ united collection of matrixes from learning sample, represented two classes:

$X_j \in Kl_1, j \in J_1, X_j \in Kl_2, j \in J_2$:

$J_1 \cap J_2 = \varnothing, J_1 \cup J_2 = \{1,2,\ldots,\mathrm{K}\}$.

It is necessary to find $\Delta > 0$ and design linear functional $A : R^{m\times n} \to R^1$ in such a way that $(A, X_j) > \Delta, j \in J_1, (A, X_j) < -\Delta, j \in J_2$

We will designate by $\Omega(\Delta)$ the domain of real-valued vector $y^T = (\mathrm{y}_1, \ldots, \mathrm{y}_K)$ from R^K with the components which satisfy to the next constraints:

$y_j > \Delta, j \in J_1, y_j < -\Delta, j \in J_2$

2.2 LDP solution

LDP solution for matrices spaces is because the vector of "discriminating" values $\left((A, X_1)_{tr}, \ldots, (A, X_K)_{tr}\right)^T$ of discriminating linear forms $(A, X)_{tr}$ determines the value of conjugate operator to cortege operator $\wp_\chi : \chi = (\mathrm{X}_1 \vdots, \ldots, \vdots \mathrm{X}_K)$ on argument A.

The next theorem then is valid.

Theorem 5. LDP is equivalent of linear equation problem $\wp_\chi^* X = y$ for cortege operator $\wp_\chi, \chi = (\mathsf{X}_1 \vdots,...,\vdots \mathsf{X}_K)$ and $(A, X_j) > \Delta, j \in J_1, (A, X_j) < -\Delta, j \in J_2$.

Proof . Indeed, fulfilling of (1) means that vector

$$y : \left((A, X_1),...,(A, X_K)\right) \equiv y^T \quad (1)$$

belongs to $\Omega(\Delta)$.

Theorem 6. allows to conclude, that (1) is equivalent to solvability the equation $\wp_\chi^* \mathsf{A} = \mathsf{y}, \chi = (\mathsf{X}_1 \vdots,...,\vdots \mathsf{X}_K), \mathsf{y} \in \Omega(\Delta)$. And, thus, the proof of the theorem is finished.

Theorem 7. LDP is solvable if there exists $y_* \in \Omega(\Delta) \subseteq R^K$ and correspond solution is determined by the equality

$$A = \wp_\chi^{*+} y_* \quad (2)$$

Corollary 1. LDP is solvable if there exists $y_* \in \Omega(\Delta) \subseteq R^K$ for which the next condition is fulfilled

$$y_*^T Z(\wp_\alpha) y_* = y_*^T (E_K - \sum_{k=1}^{r} v_k v_k^T) y_* = 0$$

and correspond solution is still determined by (2).

Theorem 8. LDP is equivalent to quadratic optimization problem for quadratic form

$$y^T Z(\wp_\alpha) y = y^T (E_K - \sum_{k=1}^{r} v_k v_k^T) y$$

In domain $\Omega(\Delta) \subseteq R^K$. If the solution y_* of the optimization problem in the domain gives minimum, that equal zero, then matrix A - LDP solution, is determined by equality

$$A = \wp_\chi^{*+} y_*.$$

3 Linear Discrimination Problem: algorithm

When saying about the algorithm of matrix LDP problem with united for two classes collection of matrices $X_1,...,\mathsf{X}_K \in R^{\mathsf{m}\times n}$ then it starts with the first step"

1-st step: calculation of Gram' matrix for collection of matrices $X_1,...,\mathsf{X}_K \in R^{\mathsf{m}\times n}$:

$$F = \begin{pmatrix} trA_1^T A_1,...,trA_1^T A_K \\ \cdots \\ trA_K^T A_1,...,trA_K^T A_K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (A_1, A_1)_{tr},...,(A_1, A_K)_{tr} \\ \cdots \\ (A_K, A_1)_{tr},...,(A_K, A_K)_{tr} \end{pmatrix}.$$

And then:

2-nd step: computing the singularities $(v_k, \lambda_k^2), \lambda_k^2 > 0,\ k = \overline{1,r},\ r = rankF$;

3-d step: calculating the matrixes $E_K - \sum_{k=1}^{r} v_k v_k^T$ of quadratic form ;

4-th step: calculating the minimum of quadratic form $y^T \left(E_K - \sum_{k=1}^{r} v_k v_k^T \right) y$ in domain $\Omega(\Delta) \subseteq R^K$ (numerical methods) and correspondent argument y_*;

4-th step: verification the conditions of zero value of minimum: if $y_*^T \left(E_K - \sum_{k=1}^{r} v_k v_k^T \right) y_* = 0$:

5-th step:

- if condition is fulfilled: $y_*^T \left(E_K - \sum_{k=1}^{r} v_k v_k^T \right) y_* = 0$, then computing linear form A of LDP-solution accordingly to relation

$$A = \wp_\chi^{*+} y_* = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i^{-1} \frac{1}{\lambda_i} \sum_{k=1}^{K} X_k v_{ki} (v_i, y_*) = \\ = \sum_{i=1}^{r} \sum_{k=1}^{K} \lambda_i^{-2} v_{ki} X_k (v_i, y_*);$$

- if condition is not fulfilled, then LDP is unsolvable.

Список використаних джерел

1. *Кириченко Н.Ф., Лепеха Н.П.* Применение псевдообратных и проекционных матриц к исследованию задач управления, наблюдения и идентификации. //Кибернетика и системный анализ. – 2002. – № 4. – С. 107 - 124.
2. *Кириченко Н.Ф., Донченко В.С., Сербаев Д.П.* Нелинейные рекурсивные регрессионные преобразователи: динамические системы и оптимизация. //Кибернетика и системный анализ. – №3, 2005. – С. 58 - 68.
3. *Кириченко Н.Ф., Кривонос Ю.Г., Лепеха Н.П.* Синтез систем нейрофункциональных преобразователей в решении задач классификации. //Кибернетика и системный анализ. – 2007. – №3. С. 47 - 57
4. *Донченко.В,С.* Евклидовы пространства числовых векторов и матриц: конструткивные методы описания базовых структур и их использование. //International Journal "Information technologies & Knowledge". - 2011. - Vol. 5.- Number 3. - С. 203 - 216.
5. *Донченко В, Зінько Т, Скотаренко Ф.* "Вектори Ознак" в задачі групування інформації: вектори і матриці. - Problems of Computer Intellectualization.- Institute of Cybernetics NASU, ITHEA.-Kyiv, Ukraine -Sofia, Bulgaria. - 2012. - С. 111 - 124

References

1. KIRICHENKO, M. & LEPEHA, M . (2002) *The use of pseudo-and projection matrices to research problems of control, surveillance and identification.//* Cybernetics and Systems Analisys – 2002. – № 4. – P. 107 - 124.
2. KIRICHENKO, M. & DONCHENKO, V. & SERBAEV, D (2005). *Nonlinear regression recursive converters: dynamical systems and optimization* .// Cybernetics and Systems Analysis. – №3, 2005. – P. 58 - 68.
3. KIRICHENKO,M.. & KRIVONOS, Y. & LEPEHA, M . (2007) *Synthesis systems neurofunctional converters in solving classification problems. //* Cybernetics and Systems Analysis. – 2007. – №3. P. 47 - 57
4. DONCHENKO, V. (2011) *Euclidean spaces numerical vectors and matrices: design methods for describing the basic structures and their use. //* International Journal "Information technologies & Knowledge".- 2011. - Vol. 5. - Number 3. - P. 203 - 216.
5. DONCHENKO, V, ZINKO, T, SKOTARENKO, F. (2012) *"Feature Vectors" in Grouping Information Problem in Applied Mathematics: Vectors and Matrixes.* - Problems of Computer Intellectualization.- Institute of Cybernetics NASU, ITHEA.-Kyiv, Ukraine -Sofia, Bulgaria. - 2012. - P. 111 - 124.

Received 27.08.2014

УДК 519.72

І.О. Завадський, к. ф.-м. н., доцент

Завадостійкі коди на основі скінченних автоматів як узагальнення згорткових кодів

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

Igor O. Zavadskyi, Associate Professor, Ph. D.

The error-correcting codes by means of finite automatons as generalization of convolutional codes

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova av., 4d

У роботі описано метод завадостійкого кодування на основі скінченних автоматів, що може розглядатися як узагальнення широко відомих згорткових кодів. Показано, що деякі коди на основі скінченних автоматів є ефективнішими за згорткові коди за тієї ж обчислювальної складності алгоритму декодування.

Ключові слова: завадостійке кодування, скінченний автомат, згортковий код.

The forward error correcting codes exploiting the finite automatons as core encoding and decoding unit are introduced. As is known, the convolutional codes can be represented in the form of finite automaton diagram as well, but such diagram has some restrictions, e.g. it should contain 2^n states and symbols written to output code should be calculated as the results of linear functions of state number and input symbol. It is shown in the paper how the efficiency of convolutional codes can be improved with no complexity cost if to avoid the linearity restriction. The computational experiment results are presented in the paper. It is shown that for some values of E_s/N_0 ratio the finite automaton code with semi-randomly generated markup using the algorithm presented can outperform the NASA convolutional code with the same number of states by 7–8%. Also some general principles of finite automaton codes efficiency estimation are outlined in the paper.

Key words: error correcting, finite automaton, convolutional codes.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

Одним із найпоширеніших різновидів завадостійких кодів є згорткові коди, що детально досліджені в [1]. Своїй популярності вони завдячують високій ефективності, простоті кодувального алгоритму та швидкості методів декодування, насамперед методу Вітербі. Однак, як буде показано в цій статті, згорткові коди є лише частинним випадком кодів на основі скінченних автоматів. Ми також сконструюємо коди на основі скінченних автоматів, які виправляють помилки ефективніше за найкращі зі згорткових кодів за тієї самої обчислювальної складності.

Кодування

Кодування, тобто перетворення вхідної послідовності бітів на ту, що передаватиметься каналом зв'язку, здійснюється скінченним автоматом, стани якого пронумеровані. Стану, із якого автомат починає роботу, надамо номер 0. На кожній ітерації автомат зчитує k бітів вхідного коду і, залежно від зчитаного значення, здійснює один із 2^k переходів у якийсь із інших станів, записуючи у вихідний код p бітів, де $p > k$. Отже, код, що генерується автоматом, має швидкість k / p.

На діаграмі автомату символи, які він зчитує для здійснення того чи іншого переходу, записуватимемо над стрілкою переходу перед скісною рискою, а символи вихідного коду, що генеруються автоматом, — після неї. З кожного стану автомата виходитиме 2^k стрілок переходів. Наприклад, на рис. 1 зображено такий автомат швидкості ½ з 4 станами. Якщо на вхід автомату надійде послідовність бітів 011010, то послідовність станів автомату під час її обробки буде такою: 0,0,1,3,3,2,1, а вихідний код таким: 00 11 01 10 01 00.

Декодування

Декодування прийнятої послідовності бітів можна здійснювати за методом, подібним до методу Вітербі для згорткових кодів [1].

© І.О. Завадський, 2014

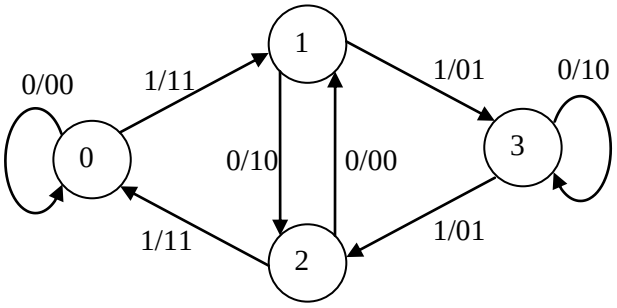


Рис. 1. Приклад кодувального автомата

Цей метод дає змогу знайти кодове слово (тобто слово, що може бути згенероване кодером), яке в певній описаній нижче метриці є найближчим до слова, отриманого кодувальним пристроєм. У разі жорсткого рішення (на вхід декодера надходять біти) такою метрикою є хемінгова відстань, однак ми розглядатимемо більш ефективне м'яке рішення: у каналі зв'язку на біти, що кодуються амплітудами 1 (одиничний біт) і –1 (нульовий біт), накладається адитивний білий гаусів шум, і на вході декодера отримуємо дійсні числа, що визначають вірогідність хибної інтерпретації того чи іншого сигналу як нульового чи одиничного біта.

Алгоритм декодування виконується у два проходи: прямий та зворотний. На *i*-му кроці прямого проходу кожному зі станів *j*, у яких автомат може перебувати після *i*-го переходу під час кодування, приписується метрика

$$m_i^j = \max_{k \in K_j} \left(m_{i-1}^k + \delta\left(s_{kj}, r_i\right) \right) \qquad (1)$$

Тут K_j — множина станів, з яких є переходи в стан *j*, s_{kj} — рядок із *p* символів, які записує автомат у вихідний код на переході з *k*-го стану в *j*-й, r_i — набір із *p* дійсних чисел — сигналів на вході декодера, що відповідають *i*-му переходу, а $\delta\left(s_{kj}, r_i\right) = \sum_{t=1}^{p} \delta_t\left(s_{kj}^t, r_i^t\right)$, де

$$\delta_t\left(s_{kj}^t, r_i^t\right) = \begin{cases} -1 - r_i^t, \text{якщо } s_{kj}^t = '0'; \\ r_i^t - 1, \text{якщо } s_{kj}^t = '1'. \end{cases}$$

Під час декодування, як і під час кодування, автомат починає роботу в нульовому стані, тому покладемо $m_0^0 = 0$.

Зображення всіх можливих переходів автомата на кількох ітераціях називатимемо *трелісом*, за аналогією зі згортковими кодами. Треліс автомату з рис. 1 для 5 перших ітерацій зображено на рис. 2. Над стрілками зазначено символи, які автомат записує у вихідний код на відповідних переходах — зіставлення цих символів переходам називатимемо їх *маркуванням*. Біля станів вказано їхні метрики за припущення, що на вхід декодера надійшов вектор сигналів із такими амплітудами: {–0,23; 0,34; 0,79; 0,05; 1,15; –1,03; –1,87; –0,71}. Жирним позначено стрілки, за якими обчислюються метрики, тобто переходи з таких станів *k*, для яких досягається максимум величини $m_{i-1}^k + \delta\left(s_{kj}, r_i\right)$.

На зворотному проході вибираємо стан з останньої ітерації з максимальною метрикою і будуємо на трелісі шлях, проходячи за жирними стрілками у зворотному напрямі, — називатимемо цей шлях *оптимальним*. Тобто в кожному стовпці треліса вибираємо по одному стану за таким принципом: якщо в *i*+1-му стовпці вибрано стан *j*, то в *i*-му стовпці вибираємо серед усіх станів, з яких є переходи у стан *j*, той, що максимізує метрику стану *j*. Якщо разом із формуванням оптимального шляху в кодувальному автоматі формувати також рядок із відповідних символів вхідного коду, дописуючи їх щоразу до рядка зліва, то отримаємо результат декодування.

Якщо на певні сигнали накладено високий рівень шуму протилежної до самих сигналів величини (тобто на сигнал з амплітудою 1 великий від'ємний шум, а на сигнал з амплітудою –1 — великий додатний шум), то стан з максимальною метрикою на ітерації, коли обробляється відповідний сигнал, може бути визначено неправильно. Однак з високою ймовірністю автомат повернеться на правильний шлях протягом кількох наступних ітерацій і при цьому шлях відкоригується і в місці помилки також.

Так, припустимо, що зазначеним вище амплітудам {–0,23; 0,34; 0,79; 0,05; 1,15; –1,03; –1,87; –0,71} на вході декодера відповідає набір бітів 00 11 10 00 на виході кодувального пристрою, тобто кодувальний автомат протягом перших 4-х ітерацій пройшов через стани 0, 0, 1, 2, 1. Однак внаслідок похибок у каналі зв'язку амплітуда 2-го біта, яка початково дорівнювала –1, була сильно викривлена і через це на 2-й ітерації максимальну метрику має стан 2, а на 3-й — стан 3, хоча за відсутності похибок такими станами мали б бути 1 і 2 відповідно. Проте вже на 4-й ітерації ситуацію виправлено: максимальну метрику має стан 1 і, рухаючись назад за жирними стрілками, отримаємо правильну послідовність станів: 0, 0, 1, 2, 1.

Таким чином, щоб виправляти помилки в останніх бітах кодового слова, ще перед кодуванням бітової послідовності її потрібно доповнювати фіктивними бітами, наприклад нульовими. Достатньою довжиною цього доповнення є $5 \log_2 N$, де N — кількість станів

автомату. Це так зване «вікно», у якому працює автомат під час декодування, і його розмір дорівнює кількості стовпців треліса, які необхідно зберігати в пам'яті програми чи апаратного пристрою, які реалізують даний метод. Тобто використовується обсяг пам'яті, що пропорційний величині $N \log_2 N$.

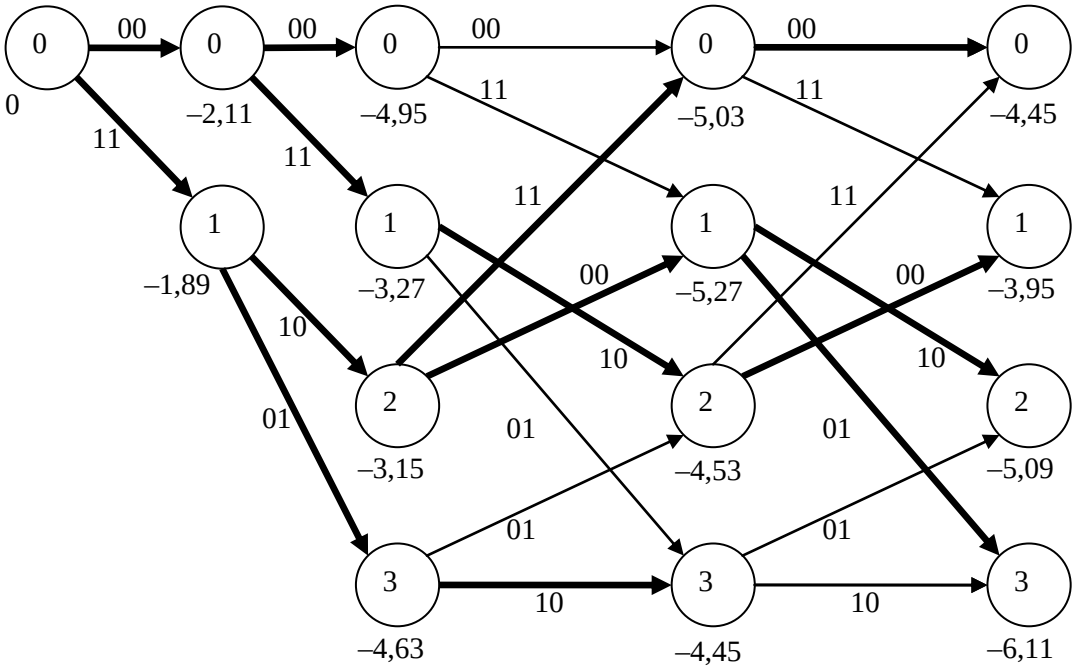
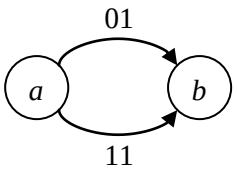


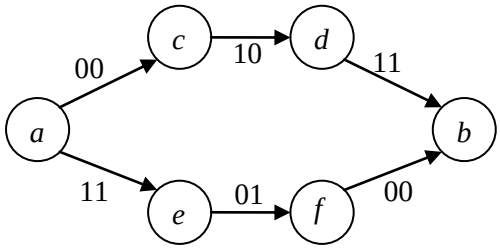
Рис. 2. Треліс декодувального скінченного автомата

Конструювання ефективних кодувальних автоматів

Як зазначалося в попередньому розділі, небажаною ситуацією під час декодування є та, коли внаслідок похибок у каналі зв'язку на певній ітерації змінюється стан, який має максимальну метрику. Однак із високою ймовірністю через певну кількість ітерацій максимальну метрику знову матиме належний стан і, якщо жирні стрілки в трелісі не змінилися, оптимальний шлях на зворотному проході буде побудовано правильно. Гірше, коли жирні стрілки змінюються — тоді навіть в разі повернення максимальної метрики до належного стану на зворотному проході певну ділянку шляху може бути побудовано неправильно і декодоване слово міститиме помилки. Ймовірність такої ситуації буде тим вищою, чим меншою є хемінгова відстань між словами, що генеруються під час проходу на трелісі або в автоматі різними шляхами, які починаються в тому самому стані a та закінчуються в тому самому стані b (називатимемо їх *напівциклами*). Наприклад, якщо з певного стану два переходи ведуть в однаковий стан і хемінгова відстань між відповідними словами у вихідному коді становить 1 (рис. 3а), то значна похибка лише в одному біті може призвести до того, що між цими станами буде встановлено хибний оптимальний шлях і на наступних ітераціях цю ситуацію жодним чином не буде виправлено. Натомість, якщо хемінгова відстань між шляхами напівциклу дорівнює 6 (рис. 3б), то велику похибку в одному сигналі, найімовірніше, буде виправлено більш коректними амплітудами інших 5 сигналів і оптимальний шлях до стану b залишиться коректним.



а



б

Рис. 3. Структури переходів між станами скінченного автомату, що можуть призводити до помилок під час декодування: помилка високоймовріна (а); ймовірність помилки значно нижча (б)

Надалі для спрощення розглядатимемо лише автомати швидкості ½, які на кожному переході зчитують 1 біт вхідного коду й записують 2 біти у вихідний код. Однак всі викладені результати неважко узагальнити й на випадок довільних кодувальних автоматів.

Отже, структури, подібні зображеним на рис. 3а, є неприпустимими. Більш точно, неприпустимою є наявність у графі автомату напівциклів, хемінгова відстань між шляхами яких є невеликою. Далі ми опишемо різні способи усунення цих небажаних структур, але насамперед вкажемо 2 простих принципи, дотримуватися яких під час створення автомату дуже просто, і які гарантуватимуть хемінгову відстань не менше 4 для напівциклів довжини не менше 2:

- переходи з того самого стану мають маркуватися рядками, хемінгова відстань між якими становить 2;
- переходи у той самий стан мають маркуватися рядками, хемінгова відстань між якими становить 2.

Оскільки автомат швидкості ½ на кожному переході зчитує 1 біт, то з будь-якого його стану має бути 2 переходи, що відповідають значенням цього біта. Перша умова означає, що рядки символів, які генеруються на цих переходах, мають бути протилежними: 00 та 11 або 01 та 10, а друга — що в кожен стан входить не більше 2 стрілок з протилежним маркуванням: 00 та 11 або 01 та 10. Зауважимо, що якщо в певний стан є менше 2 переходів, то в якийсь інший стан має бути більше 2 переходів, а отже, для дотримання другої умови необхідно, щоб у кожний стан було точно 2 переходи. Таким чином, можна сформулювати певну «структурну» властивість ефективного кодувального автомату швидкості ½: з будь-якого його стану та в будь-який його стан є точно 2 переходи.

Спробуємо застосувати для конструювання ефективного кодувального автомату ймовірнісний підхід: візьмемо автомат, переходи якого згенеровано випадковим чином, але з дотриманням умови, що з будь-якого його стану та в будь-який його стан є точно 2 переходи, і опишемо алгоритм, що дає змогу позбутися в цьому графі напівциклів довжини, меншої за деяке число k (довжиною шляху вважатимемо кількість переходів на ньому).

1. $t \leftarrow 1$.
2. Якщо $t=k$, кінець алгоритму. Інакше переглядаємо всі стани автомату. Якщо з певного стану a автомата є два шляхи довжини t, які завершуються в тому самому стані b, виконуємо кроки 3–5.
3. Нехай якийсь зі згаданих у п. 2 шляхів закінчується переходом $c \to b$. Видаляємо цей перехід.
4. Вибираємо довільний стан автомата d. Припустимо, що до цього стану ведуть переходи $e \to d$ і $f \to d$. Видаляємо будь-який із цих переходів, наприклад $e \to d$.
5. Створюємо переходи $c \to d$ і $e \to b$.
6. Якщо на кроці 2 було виявлено хоча б один стан, шляхи з якого вимагають виправлення на кроках 3–5, повертаємось на крок 2, інакше збільшуємо значення t на 1 і повертаємось на крок 2.

Якщо значення k буде завеликим, алгоритм може працювати надто довго чи взагалі не завершити роботу, оскільки під час усунення напівциклу на кроках 3–5 з великою ймовірністю утворюватиметься один чи кілька нових напівциклів. Для заданого значення k експериментальним шляхом можна визначити найменшу кількість станів автомата, для якої час роботи алгоритму усунення напівциклів довжини k буде задовільним. Відповідні співвідношення наведено в табл. 1.

Табл. 1. Співвідношення між максимальною довжиною напівциклів, які можна усунути, та найменшою кількістю станів автомата

Максимальна довжина напівциклів, які можна усунути	Найменша кількість станів автомата
2	5–7
3	15–18
4	164–167
5	1085–1090

Автомати, створені за наведеним вище ймовірнісним алгоритмом, за належного маркування, принцип якого буде наведено нижче, генерують коди з достатньо високою завадостійкістю. Однак цей показник можна покращити, якщо замість автомата, граф якого створено переважно випадково, використовувати автомат спеціальної структури, яку

опишемо далі. Цей автомат, що генерує код швидкості ½, матиме 2^m станів; у кожен стан та з кожного стану буде по 2 переходи. Якщо не враховувати переходи зі станів із номерами від 2^{m-1}до 2^m–1, то граф має структуру бінарного дерева, у кожну вершину якого входить одна дуга. Друга дуга до кожної вершини спрямована від одного з листків цього дерева (рис. 4).

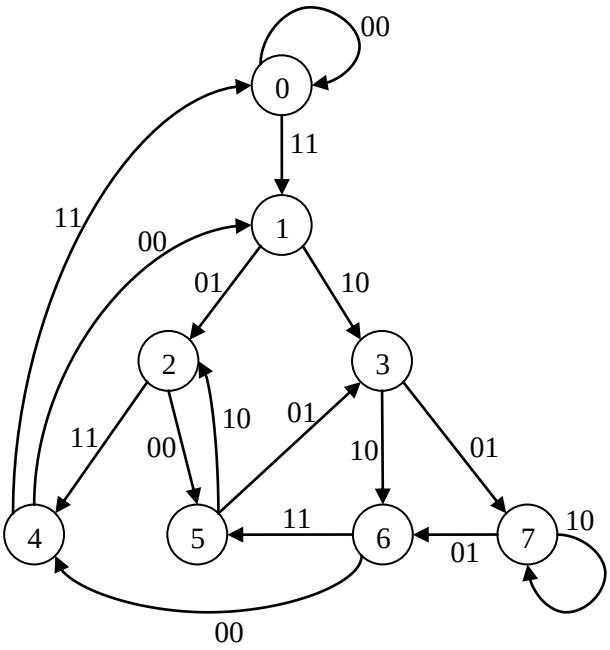


Рис. 4. Деревоподібний кодувальний автомат

Опишемо алгоритм створення структури деревоподібного автомата.

1. Для кожного стану *a* перевіряємо, чи є з нього шляхи.
2. Створюємо переходи 0→0 та 0→1.
3. Створюємо деревоподібну структуру переходів зі станів із номерами від 1 до 2^{m-1}–1: з кожного такого стану *i* створюємо переходи в стани 2*i* та 2*i*+1.
4. Для кожного стану *i*, $2^{m-1} \le i < 2^m$, створюємо переходи в стани $2i–2^m$ та $2i–2^m+1$.

Автомат, побудований за цим алгоритмом, має важливу властивість, що встановлюється лемою 1.

Лема 1. Деревоподібний автомат з 2^m вершинами, побудований за наведеним вище алгоритмом, не містить напівциклів довжини, що менша або дорівнює *m*.

Доведення. Розглянемо подання номера *i* деякого стану автомата у двійковому вигляді. З цього стану може бути виконано перехід до станів 2*i*, 2*i*+1, $2i–2^m$ або $2i–2^m+1$. Перехід до стану 2*i* означає зсув двійкового подання номера *i* вліво на 1 біт, перехід до стану 2*i*+1 — зсув вліво на 1 біт та інверсію наймолодшого (першого) біта, перехід до стану $2i–2^m$ — зсув вліво на 1 біт та інверсію найстаршого (*m*+1-го) біта, а перехід до стану $2i–2^m+1$ — зсув вліво на 1 біт та інверсію найстаршого й наймолодшого бітів. Отже, який би перехід не здійснювався, той біт, який був у двійковому поданні номера стану *i* наймолодшим, наступної ітерації зсунеться вліво на 1 позицію, але його значення не зміниться. Більше того, його значення не зміниться протягом *m* ітерацій, аж поки він не стане найстаршим (*m*+1-м). Тепер зауважимо, що наймолодші біти номерів станів, у які може бути виконано перехід із будь-якого стану *i*, завжди відрізняються. А отже, відрізнятимуться другі біти номерів станів, у які можна потрапити різними шляхами зі стану *i* за два переходи, треті біти номерів станів, у які можна потрапити різними шляхами зі стану *i* за три переходи і т.д. Таким чином, з певного стану неможливо потрапити в один той самий інший стан різними шляхами довжини менше, ніж *m*+1.

Лему доведено.

Результат, що встановлюється лемою 1 для деревоподібного кодувального автомату, значно кращий за аналогічний показник для випадкових автоматів, наведений у табл. 1. Це підтверджується і експериментальними оцінками завадостійкості кодів, що генеруються цими автоматами.

Що стосується маркування скінченного автомата, нижче буде наведено алгоритм, який дає змогу дотримуватися трьох умов.

1. Переходи з того самого стану маркуються протилежними рядками, тобто 00 та 11 або 01 та 10.
2. Переходи у той самий стан маркуються протилежними рядками.
3. Якщо мають місце переходи *a*→*b* і *a*→*c*, то переходи зі станів *b* і *c* повинні маркуватися різнотипними маркуваннями, тобто якщо переходи з одного з цих станів маркуються як 00 і 11, то переходи з іншого стану мають маркуватися як 01 і 10.

Виконання перших двох умов, як зазначалося вище, гарантує, що хемінгова відстань між шляхами будь-яких напівциклів, що містять не менше 2 ребер, становитиме не менше 4, а третя умова, як не важко побачити,

гарантує, що хемінгова відстань між шляхами будь-яких напівциклів довжини не менше 3 становить не менше 5. Отже, опишемо алгоритм маркування автомату довільної структури, який гарантує дотримання цих трьох принципів.

1. Переходи зі стану 0 маркуємо як 00 та 11, а переходи зі стану 1 — як 01 та 10.

2. Переглядаємо всі стани. Якщо точно один із переходів у стан маркований, маркуємо інший перехід у цей стан протилежним рядком.

3. Переглядаємо всі стани. Якщо точно один із переходів зі стану маркований, маркуємо інший перехід із цього стану протилежним рядком.

4. Повторюємо кроки 3 і 4 доти, доки з'являтимуться нові маркування.

5. Переглядаємо всі стани. Якщо переходи із деякого стану *a* не марковані, маркуємо їх протилежними рядками так, щоб не порушувався принцип 3 ані для переходів у стан *a*, ані для переходів з цього стану, і повертаємося на крок 3. Якщо жодного немаркованого стану не знайдено, маркування завершено.

Зауважимо, що неважливо, яким саме значенням вхідного біта зіставляти одну чи другу стрілку, що виходять зі стану автомата: оскільки значення бітів у вхідному потоці рівноймовірні, згаданий вибір не впливає на завадостійкість коду.

Зв'язок зі згортковими кодами

Розглянемо несистематичний згортковий код швидкості ½ з пам'яттю *m*. Кожної ітерації його кодувальний пристрій зчитує з вхідного потоку *m* двійкових символів, які позначимо $x_t,\ldots, x_{t+m-1}$ та обчислює на їх основі дві лінійні функції:

$$y_1 = x_{i_1} \oplus x_{i_2} \oplus \ldots \oplus x_{i_k}$$

$$y_2 = x_{j_1} \oplus x_{j_2} \oplus \ldots \oplus x_{j_l}$$

Значення цих функцій, тобто біти y_1 та y_2, записуються у вихідний код. Наступної ітерації кодувальний пристрій зчитує символи $x_{t+1},\ldots, x_{t+m+1}$, знову обчислює на них ті самі лінійні функції, записує 2 біти в код на виході і т.д. Якщо інтерпретувати біти $x_t,\ldots, x_{t+m-1}$ як двійкове подання номера *i* стану скінченного автомата, то цей автомат матиме 2^m вершин, а наступне двійкове число x_{t+1} ,…, x_{t+m} дорівнюватиме:

$2i$, якщо $x_t = 0$ і $x_{t+m} = 0$;

$2i + 1$, якщо $x_t = 0$ і $x_{t+m} = 1$;

$2i - 2^{m+1}$, якщо $x_t = 1$ і $x_{t+m} = 0$;

$2i - 2^{m+1} + 1$, якщо $x_t = 1$ і $x_{t+m} = 1$.

Це означає, що діаграма станів згорткового коду швидкості ½ має таку саму деревоподібну структуру, як описано в попередньому розділі. Однак згортковий код має додаткове обмеження стосовно маркування: біти маркерів переходів є значеннями двох лінійних функцій, що залежать від номера стану переходу. У довільному коді з деревоподібним автоматом, який марковано за наведеним у попередньому розділі алгоритмом, ці функції не обов'язково є лінійними і в деяких випадках можуть забезпечувати вищу завадостійкість, ніж найкращі згорткові коди відповідної швидкості та пам'яті. Так, у табл. 2 порівнюється завадостійкість найвідомішого й найефективнішого згорткового коду швидкості ½ та пам'яті 6 — коду NASA (171,133) із найкращим зі 100 деревоподібних кодів, автомати яких мають ту саму кількість вершин і були марковані за наведеним вище ймовірнісним алгоритмом. Як видно, завадостійкість запропонованого нами коду для деяких значень E_b/N_0 дещо вища. Чисельний експеримент проводився для м'якого рішення декодера на основі алгоритму Вітербі на неквантованому каналі BPSK.

Табл. 2. Порівняння завадостійкості кодів

E_b/N_0, Дб	BER, NASA (171,133)	BER, Finite automaton code
–1	0,302	0,293
0	0,1551	0,1432
1	0,1309	0,1309
2	0,005	0,0049

Слід особливо підкреслити, що виграш в ефективності виправлення помилок досягається без жодних додаткових витрат часу або пам'яті декодера порівняно з декодуванням згорткового коду за методом Вітербі.

Список літератури

1. *Johannesson R., Zigangirov K. S.* Fundamentals of Convolutional Coding, IEEE Press, 1999. – 400 p.

References

1. Johannesson R., Zigangirov K. S. (1999), *Fundamentals of Convolutional Coding,* IEEE Press. – 400 p.

Надійшла до редколегії 27.06.2014

УДК 519.6 531

Зуб С. С.[1], к.т.н.,
Зуб С. І.[2], с.н.с.

Рівняння гамільтонової динаміки твердого тіла в кватерніонних змінних. Магнітний диполь в зовнішньому полі

[1]Харківський національний педагогічний університет імені Григорія Сковороди, 61002, м.Харків, вул. Артема, 29,
e-mail: stah@univ.kiev.ua
[2]Національного наукового центру «Інститут метрології», 61002, м.Харків, вул. Мироносицька, 42,
e-mail: sergii.zub@gmail.com

S. S. Zub[1], PhD,
S. I. Zub[2], researcher.

Hamiltonian equation of a rigid body dynamics in quaternion variable. The magnetic dipole in an external field

[1]H.S. Skovoroda Kharkiv National Pedagogical University, 61002, Kharkiv, Artema str., 29,
e-mail: stah@univ.kiev.ua

[2]National Scientific Centre «Institute of Metrology», 61002, Kharkiv, Myronosicka st., 42,
e-mail: sergii.zub@gmail.com

У даній статті наведено явний вираз для симплектичної 2-форми на $T^*(S^3)$ у диференціалах кватерніонних змінних, показано, що ця 2-форма природним чином виражаються через кватерніонозначні диференціальні форми, і що вона збігається з симплектичною структурою, що індукується з $H \times H$. Виведені гамільтонові рівняння руху для магнітного диполя в зовнішньому полі в змішаному представленні.

Ключові слова: кватерніон, симплектична структура, рівняння руху.

This paper presents an explicit expression of the symplectic 2-form on $T^*(S^3)$ in differentials of the quaternion variables. It is shown that the 2-form is naturally expressed in terms of differential forms of the quaternions. It is shown that it coincides with symplectic structure induced from the $H \times H$. The canonical Poisson structure on the cotangent bundle of $T^*(S^3)$ group of the unit quaternions of $S^3 \subset H$ is considered. It is shown that Poisson brackets of the quaternion variables can be derived directly from the canonical Poisson brackets on the cotangent bundle to the group $SE(3)$ equipped with standard symplectic geometry and corresponds to the Liouville form on $T^*(SE(3))$. This results are based on the representation of the quaternion variables as the explicit functions of the elements of rotation matrix of the group SO(3). The algebraic meaning of the Poisson brackets of the quaternion variables was clarified and the relationship to the internal structure of the group was also revealed. The Hamiltonian equations of motion for a magnetic dipole in an external field in the mixed representation were derived.

Key Words: quaternion, symplectic structure, motion equations.

Статтю представив д.т.н. Кудін В.І.

1. Вступ

Застосуванню кватерніонів щодо опису *кінематики* твердого тіла присвячено величезну кількість публікацій, чого не можна сказати про їх застосування в *динаміці*.

Лагранжева динаміка в кватерніонних змінних дана в роботі В.В. Козлова. Виходячи з глибоких зв'язків між алгеброю кватерніонів та групами $SO(3)$ і $SO(4)$, А.В. Борисов та І.С. Мамаєв запропонували структуру Лі-Пуассона, що придатна для формулювання рівнянь руху твердого тіла в кватерніонних змінних. Огляд робіт з застосування кватерніонів в динаміці твердого тіла проведено в роботах [1,2].

© С.С. Зуб, С.І. Зуб, 2014

У роботі [1] показано, що дужки Пуассона з кватерніонними змінними можуть бути виведені безпосередньо з канонічних дужок Пуассона (не Лі-Пуассона) на кодотичному розшаруванні до групи $SE(3)$, що забезпечено стандартною симплектичною геометрією, яка відповідає формі Ліувіля на $T^*(SE(3))$. Отримані результати базуються на представленні кватерніонних змінних як явних функцій елементів матриці обертань групи $SO(3)$.

У роботі [2] розглядається канонічна пуассонова структура на кодотичному розшаруванні $T^*(S^3)$ групи одиничних кватерніонів $S^3 \subset H$. Прояснено алгебраїчний сенс дужок Пуассона з кватерніонними змінними та розкрито їх зв'язок з внутрішньою структурою групи.

Інтерес до кватерніонів в застосуванні щодо опису руху твердого тіла завжди був пов'язаний з простотою та компактністю цього підходу, його незалежністю від конкретної системи координат. При цьому розмірність простору кватерніонів (тобто 4) лише на одиницю більше необхідного для Лагранжевого опису (наприклад, 3 кути Ейлера). Таким чином для кватерніонних параметрів вводиться лише один зв'язок — $|q|=1$ (при матричному описі необхідно враховувати 6 зв'язків для ортогональних матриць).

Інші переваги використання кватерніонів при моделюванні та пов'язоні з цим роботи обговорюються в [1,2]

Відзначимо, що в статті [2] використовується представлення так званої лівої тривіалізації для дужок Пуассона між базовими динамічними змінними, а в статті [1] - представлення правої тривіалізації [3-5]. Як показано в [3], лівій тривіалізації при теоретико-груповом описі механіки твердого тіла відповідає система відліку, що пов'язана з тілом, а правій тривіалізації відповідає інерціальна система. Перехід між цими представленнями є канонічним перетворенням, яке приведено в роботах [3,5].

На наш погляд найбільш природним є опис поступальних ступенів свободи в інерціальній системі відліку, а обертальних в система відліку, що пов'язана з тілом.

2. Симплектичні форми, які асоціюються із скалярним добутком

Алгебра кватерніонів H як векторний простір має Евклідову метрику $|q|^2$ [1]. Тоді на $H \times H$ згідно прикладу [4, d с. 67] визначена симплектична форма Ω, яка в даному випадку має вигляд

$$\Omega((Q_1,Q_2),(\Pi_1,\Pi_2)) = \langle \Pi_2, Q_1 \rangle - \langle \Pi_1, Q_2 \rangle, \quad \Pi_1,\Pi_2,Q_1,Q_2 \in H \tag{2.1}$$

($\langle , \rangle$- скалярний добуток в H, що відповідає згаданій вище метриці, так що виконується - $\langle q,q \rangle = |q|^2$).

Ця 2-форма є (з точністю до знаку) зовнішнім диференціалом 1-форми Ліувіля Θ

$\Omega = -d\Theta, \quad \Theta((Q,\Pi)) = <\Pi,Q>, \quad \Pi,Q \in H$ (2.2)

У роботі [2] симплектична структура на кодотичному розшаруванні $T^*(S^3)$ до групи одиничних кватерніонів S^3 розглядалася як частинний випадок універсального підходу з точки зору груп Лі [3,5].

Виявляється, що симплектична структура з [2] та симплектична структура, що визначається виразом (2.1), тісно пов'язані. Цей зв'язок встановлюється в наступних розділах.

3. Індукована симплектична структура на підмноговиді ріманового простору

У пропозиції 6.2-1 [4, с. 165] розкривається зв'язок між 1-формою Ліувіля Θ_N на кодотичному розшаруванні $T^*(N)$ підмноговиду $N \subset M$ деякого многовиду M і 1-формою Ліувіля Θ_M на кодотичному розшаруванні $T^*(M)$ цього многовиду.

З цієї пропозиції видно, що в загальному випадку немає способу вкладення $T^*(N)$ у $T^*(M)$, коли N є підмноговидом многовиду M.

Проте, таке відображення можна побудувати, якщо задана нормалізація [6, с. 220] $T(N) \subset T(M)$, зокрема, коли на M задана метрика, що індукує метрику на N.

У останньому випадку кодотичне розшарування $T^*(N)$ можна ототожнити з дотичним розшаруванням $T(N)$, яке, у свою

чергу, канонічно вкладається в $T(M)$, еквівалентне до $T^*(M)$ (завдяки метриці на M).

Пропозиція. Нехай $N \subset M$, $N \xrightarrow{\iota} M$ - підмноговид рімановового многовиду M. Тоді на N індукується метрика з M і N стає рімановим підмноговидом M. На дотичному розшаруванні кожного рімановового многовиду, у тому числі на M і N, існує стандартна симплектична структура, причому така симплектична структура на TN збігається з індукованою з TM вкладенням $T\iota$.

□

Для будь-якого рімановового многовиду Q можна визначити пошаровий дифеоморфізм χ_Q

$$\begin{array}{ccc} TN & \xrightarrow{T\iota} & TM \\ {\scriptstyle q_N}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle q_M} \\ N & \xrightarrow{\iota} & M \end{array} \tag{3.1}$$

$$p \circ \chi_Q = q \tag{3.1a}$$

де χ_Q визначається так [3]

$$\chi_Q(u_x)\cdot v_x = \langle u_x, v_x \rangle, \quad u_x, v_x \in T_xQ \tag{3.2}$$

Форма Ліувіля на T^*Q виражається стандартним чином

$$\theta^0(\xi_\alpha) = \alpha[Tp\cdot\xi_\alpha], \quad \xi_\alpha \in T_\alpha(T^*Q) \tag{3.3}$$

За допомогою дифеоморфізму χ визначаємо 1-форму на TQ

$$\theta = \chi^*\theta^0 \tag{3.4}$$

а отже

$$\theta(\xi_u) = \chi^*\theta^0(\xi_u) = \theta^0(T\chi[\xi_u])$$
$$= \chi(u)[Tp\circ T\chi[\xi_u]] = \chi(u)[Tq[\xi_u]] = \langle u, Tq[\xi_u]\rangle$$

тобто

$$\theta(\xi_u) = \langle u, Tq[\xi_u]\rangle, \quad \xi_u \in T_u(TQ) \tag{3.4a}$$

1-форма θ визначає симплектичну структуру на TQ по формулі

$$\omega = -d\theta = -d\chi^*\theta^0 = \chi^*\omega^0 \tag{3.5}$$

оскільки χ - дифеоморфізм.

Має місце діаграма

$$\begin{array}{ccc} TQ & \xrightarrow{\chi_Q} & T^*Q \\ {\scriptstyle q}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle p} \\ M & \xrightarrow{id} & M \end{array} \tag{3.6}$$

з якої випливає

$$\iota\circ q_N = q_M \circ T\iota \tag{3.6a}$$

Метрика на M індукує невироджену метрику на N

$$\langle u_n, v_n\rangle_N = \langle T\iota[u_n], T\iota[v_n]\rangle_M, \quad u_n, v_n \in T_nM \tag{3.7}$$

Покажемо, що 1-форма θ_N на TN індукується з 1-форми θ_M на TM вкладенням $T\iota$

$$\theta_N(\xi_u) = \langle u, Tq_N[\xi_u]\rangle_N = \langle T\iota\cdot u, T\iota\circ Tq_N[\xi_u]\rangle_M$$
$$= \langle T\iota\cdot u, Tq_M[TT\iota\cdot\xi_u]\rangle_M = \theta_M(TT\iota\cdot\xi_u), \quad \xi_u \in T_u(TN)$$

тобто

$$\theta_N(\xi_u) = \theta_M(TT\iota\cdot\xi_u), \quad \forall\xi_u \in T_u(TN) \tag{3.8}$$

або $\theta_N = T\iota^*\theta_M$.

Симплектичні 2-форми на TM і TN визначаються виразами

$$\begin{cases} \omega_M = -d\theta_M, \\ \omega_N = -d\theta_N = -d(T\iota^*\theta_M) = T\iota^*\omega_M \end{cases} \tag{3.9}$$

■

Зауваження. Симплектичні структури на дотичних просторах є об'єктами вивчення в лагранжевій механіці на многовидах. Симплектичний дифеоморфізм χ_Q є частковим випадком перетворення Лежандра.

4. Індукована симплектична структура на $T^*(S^3)$

Група одиничних кватерніонів S^3, як многовид, є підмноговидом (гіперповерхнею) в алгебрі H, що розглядається як евклідів простір з нормою $|q| = \sqrt{qq^\dagger}$.

$$S^3 \subset H, \quad \iota: S^3 \to H \tag{4.1}$$

Т.ч. до S^3 як підмноговиду ріманова простору застосовні всі твердження попереднього розділу. Зокрема, можна ототожнювати розшарування TS^3 і T^*S^3 за допомогою пошарового симплектичного дифеоморфізму χ.

Кодотичне розшарування $T^*(S^3)$, як це показано в [2], є безліччю пар виду

$$T^*(S^3) = \{(q,\pi) : |q| = 1, \langle q,\pi\rangle = 0, \quad q,\pi \in H\} \to T^*(S^3) \subset H\times H \tag{4.2}$$

тобто має місце вкладення $\kappa \equiv Ti$ кодотичного розшарування $T^*(S^3)$ у $H \times H$

$$\kappa : T^*(S^3) \to H \times H \qquad (4.3)$$

Вкладення κ індукує на $T^*(S^3)$ з $H \times H$ 1-форму $\kappa^*\Theta$, яка, відповідно до *Пропозиції* попереднього розділу, збігається з канонічною 1-формою Ліувіля θ на $T^*(S^3)$. Тобто

$$\kappa^*\Theta = \theta \qquad (4.4)$$

З (4) і (3.2а) випливає

$$\theta_{(q,\pi)}((\xi,\rho)) = \langle \pi, \xi \rangle \qquad (4.5)$$

Крім того, внаслідок інваріантності скалярного добутку відносно лівих і правих зсувів

$$\theta_{(q,\pi)}((\xi,\rho)) = \langle \pi, \xi \rangle = \langle q^{-1}\pi, q^{-1}\xi \rangle = \langle \mu, q^{-1}dq(\xi) \rangle \qquad (4.6)$$

що збігається з виразом для форми Ліувіля на $T^*(S^3)$ у представленні лівої тривіалізації [2].

Отже, внаслідок

$$\omega = -d\theta = -d(\kappa^*\Theta) = -\kappa^* d\Theta = \kappa^*\Omega$$

доведено, що симплектична структура, що отримана в [2] і є канонічною структурою для $T^*(S^3)$, як для кодотичного розшарування групи одиничних кватерніонів, збігається з симплектичною структурою, що індукується з $H \times H$.

Виразу (4.6) можна надати вигляд (відповідний до лівої тривіалізації)

$$\theta_{(q,\mu)} = \langle \mu, q^{-1}dq \rangle \qquad (4.7)$$

Отже формально можна записати зовнішній диференціал (4.6) таким чином

$$d\theta = d\mu \cdot \wedge q^{-1}dq - \mu \cdot (q^{-1}dq \wedge q^{-1}dq) \qquad (4.8)$$

тобто симплектична 2-форма в представленні лівої тривіалізації має вигляд

$$\omega = q^{-1}dq \cdot \wedge d\mu + \mu \cdot (q^{-1}dq \wedge q^{-1}dq) \qquad (4.9)$$

де скалярний добуток ($\langle , \rangle$ або $\cdot$) застосовується до кватерніонних твірних, а грассманов (зовнішній) добуток відноситься до диференціалів кватерніонних змінних (див. розділ 5).

5. Кватерніоннозначні диференціальні форми

Вирази $q^{-1}dq$, $q^{-1}dq \wedge d\mu$ і подібні до них є, по суті, кватерніоннозначними диффформами, тобто диффформами на H із значеннями в H. Тому розглянемо коротко властивості цих об'єктів.

Найбільш простий спосіб ввести їх — це розглянути асоціативну алгебру з одиницею над полем дійсних чисел з твірними

$$e_i, i = 1..3 \text{ і } dq^\mu, \mu = 0..3 \qquad (5.1)$$

які задовольняють

$$\begin{cases} e_r e_s = -\delta_{rs} e_0 + \varepsilon_{rts} e_t, \\ dq^\mu dq^\nu = -dq^\nu dq^\mu \\ e_r dq^\mu = dq^\mu e_r \end{cases} \qquad (5.2)$$

1. Завдяки 3-й властивості з (5.2) завжди можна розташовувати всі твірні dq^μ праворуч від твірних e_r. Т.ч. кожен одночлен буде представлений у вигляді кватерніонного "коефіциента" та простої зовнішньої форми виду $dq^{\mu_1} \ldots dq^{\mu_k}$, яку будемо записувати у вигляді $dq^{\mu_1} \wedge \ldots \wedge dq^{\mu_k}$.

2. Т.ч. до нашої алгебри належать всі елементи виду

$$e_\alpha dq^{\mu_1} \wedge \ldots \wedge dq^{\mu_k}, \alpha, \mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_k \in 0..3, \quad \mu_1 < \mu_2 \ldots < \mu_k \qquad (5.3)$$

Ці елементи і є базисом нашої алгебри.

3. Фактично, твердження 2 означає, що наша алгебра є тензорним добутком алгебри H і алгебри Грассмана зовнішніх форм на H, як на лінійному просторі.

4. При множенні одночленів вигляду (5.3) (де допустимо не мати жодного множника dq), незалежно множаться кватерніонні коефіцієнти та грассманові множники (див. 2), і оскільки обидва множення асоціативні, то і в цілому наша алгебра асоціативна.

5. Т.ч. елементи нашої алгебри є кватерніоннозначні зовнішні форми, тобто мають вигляд

$$\sum k_{\mu_1 \ldots \mu_k} dq^{\mu_1} \wedge \ldots \wedge dq^{\mu_k}, \; k_{\mu_1 \ldots \mu_k} \in H, 0 \le \mu_1 < \mu_2 \ldots < \mu_k \le 3 \qquad (5.4)$$

і повністю задовольняють всім визначенням і властивостям векторозначних зовнішніх форм (див. [6,с.134-135]).

6. Т.ч. наша алгебра є алгеброю многочленів вигляду (5.4), і її елементи перемножуються як многочлени, з врахуванням некомутативності як коефіцєнтів, так і твірних грассманового типу.

7. Зовнішній диференціал (5.4) вводиться звичайним чином, тобто

$$\mathrm{d}(k_{\mu_1 \ldots \mu_k} dq^{\mu_1} \wedge \ldots \wedge dq^{\mu_k}) = \partial_\mu k_{\mu_1 \ldots \mu_k} dq^\mu \wedge dq^{\mu_1} \wedge \ldots \wedge dq^{\mu_k} \qquad (5.5)$$

(також див. [6, с. 134-135]).

8. Т.ч. можна було б відразу визначити нашу алгебру як грассманову алгебру зовнішніх кватерніоннозначних форм, а потім визначити множення, як множення многочленів, що задовольняють співвідношенням (5.2).
В будь-якому разі всі властивості таких форм виконуються.

На відміну від векторозначних форм із значеннями в алгебрі Лі [6, с.134-135] дані об'єкти утворюють *асоціативну* алгебру з одиницею.

До введених об'єктів можна застосовувати як кватерніонні операції, так і операції, вживані до дифформ. Зокрема, операція $\cdot\wedge$ означає

$$\left\langle q^{-1}dq\wedge d\mu\right\rangle = q^{-1}dq\cdot\wedge d\mu = (q^{-1}dq)^i\wedge d\mu_i \quad (5.6)$$

$$\left\langle q^{-1}dq\wedge d\mu\right\rangle(\xi,\eta) = (q^{-1}dq(\xi))^i d\mu_i(\eta) - (q^{-1}dq(\eta))^i d\mu_i(\xi) \quad (5.6a)$$

оскільки μ_i - чистий кватерніон, що не має скалярної компоненти.

6. Пуассонови структури для динаміки твердого тіла

У статті [2] виведено кватерніонні Д.П. у представленні лівої тривіалізації, що відповідає системі відліку, що пов'язана з тілом, а в статті [1] Д.П. виведено в представленні правої тривіалізації, тобто в інерціальній системі відліку.

Розглянемо детально зв'язки між кватерніонними змінними в цих представленнях. Річ у тім, що поступальні та обертальні ступені свободи розділяються саме в інерціальній системі відліку, тобто їх взаємні Д.П. перетворюються в 0.

Отже, в представленні лівої тривіалізації ці співвідношення можуть бути записані у безкоординатному вигляді як у [2]

$$\begin{cases}\{\langle\mu,\xi\rangle,\langle\mu,\eta\rangle\} = -\langle\mu,[\xi,\eta]\rangle\\ \{q,\langle\mu,\xi\rangle\} = q\xi = L_q\xi\end{cases} \quad (6.1)$$

де ξ,η — фіксовані чисті кватерніони тобто фіксовані елементи алгебри Лі групи S^3 одиничних кватерніонів. Для переходу до представлення правої тривіалізації використовуємо співвідношення з [5]. Тобто в нашому випадку

$$\varrho_{ct}\circ\lambda_{ct}^{-1}(q,\mu) = (q, Ad^*_{q^{-1}}[\mu]) = (q, q\mu q^{-1}) \quad (6.2)$$

Т.ч. необхідно перейти до нової змінної $\tilde\mu = Ad^*_{q^{-1}}[\mu] = q\mu q^{-1}$. Для цієї змінної утворюємо вираз

$$\left\langle\tilde\mu,\xi\right\rangle = \left\langle Ad^*_{q^{-1}}[\mu],\xi\right\rangle = \left\langle\mu, Ad^*_{q^{-1}}[\xi]\right\rangle = \left\langle\mu, q^{-1}\xi q\right\rangle \quad (6.3)$$

Використовуючи властивості дужок Пуассона [4,7] в інерціальній системі, маємо

$$\begin{cases}\{\langle\tilde\mu,\eta\rangle,\langle\tilde\mu,\xi\rangle\} = \langle\tilde\mu,[\xi,\eta]\rangle,\\ \{q,\langle\tilde\mu,\xi\rangle\} = \xi q = R_q\xi;\end{cases} \quad (6.4)$$

Відмітимо, що змінні μ_i ($\tilde\mu_i$) в два рази більше фізичних компонент власного моменту імпульсу тіла [2].

7. Група $G=R^3\circledS S^3$ і Д.П. в інерціальній системі

Розглянемо напівпрямий добуток $R^3\circledS S^3$ із законом множення $(\mathbf{x},q)(\mathbf{x}',q') = (\mathbf{x}+q\mathbf{x}'q^{-1}, qq')$

Визначимо гомоморфізм $\Gamma: G\mapsto SE(3)$ як

$$(\mathbf{x},q)\mapsto(\mathbf{x},\mathbf{Q}),\qquad \mathbf{Q}[\mathbf{y}] = q\mathbf{y}q^{-1},\quad \forall\mathbf{y}\in R^3 \quad (7.1)$$

Вочевидь, група G двічі накриває $SE(3)$ [1].

Т.ч., в інерціальній системі відліку стан твердого тіла описується наступним набором базових динамічних змінних $((\mathbf{x},q),(\mathbf{p},\tilde\mu))$, де $(\mathbf{x},\mathbf{p})$ — координати центру мас тіла та його імпульс в *інерціальній системі* q - кватерніон, що відповідає матриці Q

$$\begin{cases}\mathbf{E}_k = Q_{ik}\mathbf{e}_i,\\ Q_{ji} = \langle\mathbf{E}_i,\mathbf{e}_j\rangle.\end{cases} \quad (7.2)$$

переходу від інерціальної системи e_j до системи, що пов'язана з тілом E_k; $\tilde\mu$ - чистий кватерніон, що описує власний момент тіла в інерціальній системі.

Враховуючи зв'язок між пуассоновими структурами на $SE(3)$ і G, що встановлено в [2] та (6.4), можна записати ненульові Д.П. в інерціальній системі відліку

$$\begin{cases}\{x_i, p_j\} = \delta_{ij},\\ \{q, \langle\tilde\mu,\xi\rangle\} = \xi q = R_q\xi,\\ \{\langle\tilde\mu,\eta\rangle,\langle\tilde\mu,\xi\rangle\} = \langle\tilde\mu,[\xi,\eta]\rangle\end{cases} \quad (7.3)$$

8. Д.П. у змішаному представленні

Як було зазначено вище, в інерціальній системі відліку поступальні та обертальні ступені свободи розділяються. Проте вираз обертальної енергії набагато простіший саме в системі, що пов'язана з тілом, де компоненти тензора інерції є константами. Т.ч., найприродніше описувати поступальні ступені свободи в інерціальній системі відліку, а обертальні — в системі відліку, що пов'язана з тілом. Перетворення $\mu = q^{-1}\tilde{\mu}q$ не зачіпає змінні $\mathbf{x},\mathbf{p}$, тому змінна μ також комутуватиме із $\mathbf{x},\mathbf{p}$, і в змішаному представленні матимемо такі ненульові Д.П.

$$\begin{cases} \{x_i, p_j\} = \delta_{ij}, \\ \{q, \langle \mu, \xi \rangle\} = q\xi = L_q \xi, \\ \{\langle \mu, \eta \rangle, \langle \mu, \xi \rangle\} = -\langle \mu, [\xi, \eta] \rangle \end{cases} \quad (8.1)$$

Для кінетичної енергії обертання в змішаному представленні маємо, як і в системі, що пов'язана з тілом, наступний вираз

$$T_{spin}((\mathbf{x},q),(\mathbf{p},\mu)) = \frac{1}{8}\mu I^{-1}\mu = \frac{1}{8}\left(\frac{\mu_1^2}{I_1} + \frac{\mu_2^2}{I_2} + \frac{\mu_3^2}{I_3}\right) \quad (8.2)$$

У системі, що пов'язана з тілом, вектор магнітного моменту $\mathbf{m} = m\nu$ має постійні компоненти, тоді в інерціальній системі його компонентами будуть $q\mathbf{m}q^{-1}$.

Т.ч. для потенціальної енергії диполя V_m у зовнішньому магнітному полі за допомогою [1, (4.1),(4.4)] може бути представлено

$$V_m((\mathrm{x},q),(\mathrm{p},\mu)) = -\langle \mathbf{B}, q\mathbf{m}q^{-1} \rangle = -2\left\langle \left(q_0^2 - \frac{1}{2}\right)\mathbf{m} + \langle \mathbf{m},\mathbf{q}\rangle\mathbf{q} - q_0(\mathbf{m}\times\mathbf{q}), \mathbf{B} \right\rangle \quad (8.3)$$

Відмітимо ще раз, що $\mathbf{m}$ — постійний вектор, а q не залежить від $\mathbf{x}$.

Використовуючи базові співвідношення (8.1), знайдемо ряд С.П., які знадобляться.

Для $\{q, T_{spin}\}$ отримаємо

$$\{q, T_{spin}\} = \frac{1}{2}q\Omega, \qquad \Omega = \frac{1}{2}I^{-1}\mu \quad (8.4)$$

де I — діагональна матриця.

Скористаємося визначенням Ω з (8.4) і симетричністю тензора інерції I. Нарешті

$$\{\mu, T_{spin}\} = -\Omega \times \mu \quad (8.5)$$

$$\{\mu, V_m\} = (2q_0^2 - 1)(\mathbf{m}\times\mathbf{B}) + 2\langle \mathbf{q},\mathbf{B}\rangle(\mathbf{m}\times\mathbf{q}) - 2q_0\langle \mathbf{m},\mathbf{B}\rangle\mathbf{q} + 2q_0\langle \mathbf{m},\mathbf{q}\rangle\mathbf{B} \quad (8.6)$$

9. Рівняння руху магнітного диполя в зовнішньому полі

Рівняння руху в змішанному представленні для магнітного диполя в зовнішньому полі, де на відміну від робіт [7-9] магнітний диполь розглядається як довільне (тобто, можливо, асиметричне) магнітне тіло з довільно направленим відносно тіла магнітним моментом.

Гамільтоніан магнітного диполя

$$H((\mathbf{x},q),(\mathbf{p},\mu)) = \frac{p^2}{2M} + T_{spin}(\mu) + V_m((\mathbf{x},q)) + V_g(\mathbf{x}), \quad (9.1)$$

де $V_g(\mathbf{x}) = Mgx_3$.

Запишемо рівняння руху.

$$\dot{\mathbf{x}} = \{\mathbf{x}, H\} = \frac{\mathbf{p}}{M} \quad (9.2)$$

$$p_i = \{p_i, H\} = 2\left\langle \partial_i \mathbf{B}(\mathbf{x}), \left(q_0^2 - \frac{1}{2}\right)\mathbf{m} + \langle \mathbf{m},\mathbf{q}\rangle\mathbf{q} - q_0(\mathbf{m}\times\mathbf{q}) \right\rangle - Mg\delta_{i3} \quad (9.3)$$

$$\dot{q} = \{q, H\} = \{q, T_{spin}\} = \frac{1}{2}q\Omega, \qquad \Omega = \frac{1}{2}I_{ref}^{-1}\mu \quad (9.4)$$

$$\dot{\mu} = \{\mu, H\} = \{\mu, T_{spin}\} + \{\mu, V\} = -\Omega\times\mu + (2q_0^2 - 1)(\mathbf{m}\times\mathbf{B}) + 2\langle \mathbf{q},\mathbf{B}\rangle(\mathbf{m}\times\mathbf{q}) - 2q_0\langle \mathbf{m},\mathbf{B}\rangle\mathbf{q} + 2q_0\langle \mathbf{m},\mathbf{q}\rangle\mathbf{B} \quad (9.5)$$

Отже, система рівнянь руху має вигляд

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = \dfrac{\mathbf{p}}{M}, \\ \dot{p}_i = 2\left\langle \partial_i \mathbf{B}(\mathbf{x}), \left(q_0^2 - \dfrac{1}{2}\right)\mathbf{m} + \langle \mathbf{m},\mathbf{q}\rangle\mathbf{q} - q_0(\mathbf{m}\times\mathbf{q}) \right\rangle - Mg\delta_{i3}, \\ \dot{q} = \dfrac{1}{2}q\Omega, \qquad \Omega = \dfrac{1}{2}I_{ref}^{-1}\mu, \\ \dot{\mu} = -\Omega\times\mu + (2q_0^2 - 1)(\mathbf{m}\times\mathbf{B}) + 2\langle \mathbf{q},\mathbf{B}\rangle(\mathbf{m}\times\mathbf{q}) - 2q_0\langle \mathbf{m},\mathbf{B}\rangle\mathbf{q} + 2q_0\langle \mathbf{m},\mathbf{q}\rangle\mathbf{B} \end{cases}$$

Зауваження. В нашій роботі [2, с.109] в *Пропозиція 1* має місце прикра помилка друку. Правильна формула має виглядати так

$$\mathbf{e} + \mathbf{e}^{\dagger} = 0 \longrightarrow \mathbf{e}e_0^{\dagger} + e_0\mathbf{e}^{\dagger} = 0 \longrightarrow \langle e_0, \mathbf{e} \rangle = 0 \longrightarrow \langle L_q e_0, L_q \mathbf{e} \rangle = 0,$$

де $\mathbf{e}$ - чистий кватерніон.

Список використаних джерел

1. *Зуб, С.С.* Канонічна пуассонова структура на T*SE(3) в кватерніонних змінних / С. С. Зуб, С. І. Зуб // Вісник Київського нац. унів. — 2013. — No 2. — С. 17–24.
2. *Зуб, С.С.* Група одиничних кватерніонів S^3 та пов'язані з нею симплектична і пуассонова структури / С. С. Зуб, С. І. Зуб // Вісник Київського нац. Унів. — 2013. — No 4. — С. 108–113.
3. *Abraham, R.* Foundations of mechanics / R. Abraham, J. E. Marsden. — Addison Wesley, 1978. — 848 p
4. *Marsden, J. E.* Introduction to mechanics and symmetry / J.E. Marsden, T.S. Ratiu. — Berlin: Texts in Applied Mathematics, Springer, 1994. — Vol. 75.
5. *Зуб,С.С.* Группа Ли как конфигурационное пространство для простой механической системы / С. С. Зуб // Журнал обчисл. та прикл. Матем. — 2013. — Т. 112, No 2. — С. 89–99.
6. *Зуланке, Р.* Дифференциальная геометрия и расслоения / Р. Зуланке, П. Винтген. — М.: Мир, 1975. — 348 с.
7. *Зуб,С.С.* Гамильтонов формализм для магнитного взаимодействия свободных тел / С. С. Зуб // Журнал обчисл. та прикл. Матем. — 2010. — Т.102, No 3. — С.49-62.
8. *Зуб,С.С.* Орбитрон: Устойчивость орбітального движения магнитного диполя / С.С. Зуб // Журнал обчисл. та прикл. матем.— 2013.—Т.111, No 1. —С.113–128.
9. *Dullin, H.R.* Stability of levitrons / H.R. Dullin, R.W. Easton // Physica D. — 1999. — Vol. 126, No 1. — P. 1–17.

References

1. ZUB, S. S. & ZUB, S. I. (2013) Canonical Poisson structure on T*SE(3) in the quaternion variables. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Physics &Mathematics*. 2. p.17-24.
2. ZUB, S. S. & ZUB, S. I. (2013) Grupa odinichnih kvaternioniv S^3 ta pov'yazani z neyu simplektichna i puassonova strukturi. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Physics & Mathematics*. 4. p.108-113.
3. ABRAHAM, R., MARSDEN, J. E. (1978) *Foundations of mechanics*. Addison Wesley.
4. MARSDEN, J. E., RATIU, T. S. (1994) *Introduction to mechanics and symmetry*. Berlin: Texts in Applied Mathematics, Springer.
5. ZUB, S. S. (2013) Gruppa Li kak konfiguratsionnoe prostranstvo dlya prostoy mehanicheskoy sistemyi. *Journal* of *Numerical* and *Applied Mathematics*. 112 (2). p.89-99.
6. ZULANKE, R., VINTGEN, P. (1975) *Differentsialnaya geometriya i rassloeniya*. M.: Mir.
7. ZUB, S. S. (2010) Gamiltonov formalizm dlya magnitnogo vzaimodeystviya svobodnyih tel / *Journal* of *Numerical* and *Applied Mathematics*. 102 (3). p.49-62.
8. ZUB, S. S. (2013) Orbitron: Ustoychivost orbIt-alnogo dvizheniya magnitnogo dipolya. *Journal* of *Numerical* and *Applied Mathematics*. 111 (1). p.113-128.
9. DULLIN, H. R. & EASTON, R. W. (1999) Stability of levitrons. *Physica D*. 126 (1). p.1-17.

Надійшла до редколегії 17.06.14

УДК 519.87

Івохін Є.В., д.ф.-м.н, доцент

Про нечітке представлення дійсних чисел у формі триплетів

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, м.Київ, пр-т Глушкова, 4д, e-mail: ivohin@univ.kiev.ua

Ivohin E.V., Dr.Sci.

About fuzzy real numbers presentation in triplet form

Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: ivohin@univ.kiev.ua

В роботі розглянуто алгоритмічний підхід до побудови трикутного представлення нечітких дійсних чисел, що базується на використанні двійкового запису числа за стандартом IEEE754. Розрахунок діапазону представлення та визначення кількості проміжних значень здійснюється на основі обчислення двох простих чисел, найближчих до записаної як ціле число мантиси. У якості прикладу пропонується застосування даного підходу для модифікації базового алгоритму шифрування Меркла-Хелмана, що використовує схему задачі про рюкзак .

Ключові слова: нечітке число, триплет, прості числа, алгоритм шифрування.

The formalization of uncertainty or inaccuracy in the technical processes associated with the use of 'approximate' submission process parameters, which can be carried out using fuzzy representation of real numbers in triplet form. This paper considers an algorithmic approach for constructing triangular fuzzy representation of real numbers, based on the use of binary records by standard IEEE754. Mantissa and characteristics are determined from binary record of a real number. The calculation of the range of fuzzy representation and the determination of intermediate values number is based on calculation of two simple numbers which are closest to recorded as an integer mantissa. The some computational examples are given. This method can be used in the case of absence decision maker subjective representation of fuzziness. As an application example of this approach is proposed the modification of the basic algorithm Merkle-Hellman encryption, which uses a model problem of the knapsack.

Key words: fuzzy numbers, triplets, simple numbers, encryption algorithm.

Статтю представив д.т.н., проф. Волошин О.Ф.

Вступ. При проведенні різних досліджень за умов невизначеності або неточності параметрів важливим завданням є коректно формалізувати процеси, що відбуваються в об'єкті дослідження. Часто формалізація пов’язана з використанням "наближеного" подання параметрів процесів, яке можна провести, наприклад, за допомогою нечіткого представлення довільних чисел.

Проблема представлення нечіткого числа $\widetilde{b}$ у вигляді множини пар

$$\widetilde{b} = \{(b_i, \mu(b_i)) \mid b_i \in [a,c], i \in I, a \le b \le c, \mu(b_i) \in [0,1], i \in I, \mu(b) = 1\}, \quad (1)$$

де $\mu : R \to [0,1]$ - відображення, яке визначає міру належності елемента $x \in R$ нечіткій множині $\widetilde{b}$, передбачає вирішення двох складних задач: визначення діапазону представлення $[a,c]$ нечіткого числа та задання значень функції належності для проміжних величин $b_i \in [a,c], i \in I$. Як правило, вирішення цих задач залежить від суб’єктивних факторів, що може впливати на результати задач дослідження.

В роботі [1] запропоновано застосування спеціальних множин простих чисел для визначення міри належності традиційних нечітких множин. В рамках підходу розглянуто ефективні обчислювальні схеми, які дозволяють отримувати значення функцій належності для елементів нечітких множин, що застосовуються для опису невизначеності параметрів процесу. Основна ідея, що базується на використанні простих чисел, знайшла своє продовження у роботі [2], в якій запропоновано формалізацію нечітких цілих чисел у вигляді (1). Розроблений підхід включає в себе методику обчислення діапазону представлення нечіткого трикутного числа $[a,c]$ та спосіб розрахунку мір належності проміжних значень на основі лінійних функцій

$$\mu_{\tilde{b}}(x) = \frac{x-a}{b-a}, x \in [a,b];$$
$$\mu_{\tilde{b}}(x) = \frac{c-x}{c-b}, x \in [b,c]; \quad (2)$$
$$\mu_{\tilde{b}}(x) = 0, x \notin [a,c].$$

©Є.В.Івохін, 2014

Це дозволило зробити непотрібним суб'єктивне представлення діапазону $[a,c]$ і визначати нові нечіткі поняття, що базуються на використанні цілих чисел.

Однак застосування лише цілих чисел суттєво обмежує сферу використання нечітких величин, обробка яких потрібна в реальних задачах.

В даній роботі пропонується підхід для подання нечітких дійсних чисел, який можна використати при комп'ютерному моделюванні різних процесів з урахуванням нечіткості вхідних даних.

Основний результат. Класичне поняття нечіткої множини (підмножини) заданої універсальної множини X у відповідності до Заде [3] формулюється наступним чином.

Означення 1. [3] Нечіткою множиною $\widetilde{A}$ універсальної множини X, називають сукупність пар $\widetilde{A}=\{(\mu_{\widetilde{A}}(x),x)\}$, де $\mu_{\widetilde{A}}(x): X\to[0,1]$ – відображення множини X в одиничний відрізок [0,1], яке називається функцією належності нечіткій множині.

Інтерпретацією ступеня належності $\mu_{\widetilde{A}}(x)$ є суб'єктивна міра відповідності елемента $x\in X$ поняттю, сенс якого формалізується нечіткою множиною $\widetilde{A}$.

Визначимо в якості універсальної множини X простір над полем дійсних чисел R, т.е. $X=R$. У цьому випадку розглядаються нечіткі величини, а при розв'язанні прикладних задач для формалізації нечіткості використовують інші означення нечітких величин, що еквівалентні класичному означенню 1.

Означення 2. [4] Нечітким трикутним числом $\widetilde{b}$ називають впорядковану трійку чисел *(a, b, c)*, $a\le b\le c$, для якої функція належності $\mu_{\widetilde{b}}(x)$ має вигляд (2).

Нечітке трикутне число $\widetilde{b}$, задане у вигляді трійки *(a, b, c)*, іноді називають триплетом, при чому, для довільного числа $x\in[a,b]$ справедливе представлення $x=a+\lambda(b-a),$ а для довільного $x\in[b,c]$ - $x=c-\lambda(c-b),$ де $0\le\lambda\le1$ - заданий рівень міри належності числа x нечіткій множині $\widetilde{b}$. Нечітке трикутне число виду *(a, b, b)*, яке називається лівим нечітким трикутним числом, визначається функцією належності

$$\mu_{\widetilde{b}}(x)=0, x<a;\ \ \mu_{\widetilde{b}}(x)=\frac{x-a}{b-a}, x\in[a,b];$$
$$\mu_{\widetilde{b}}(x)=1, x>b, \qquad (3)$$

а нечітке трикутне число виду *(b, b, c)*, яке називається правим нечітким трикутним числом, - функцією належності

$$\mu_{\widetilde{b}}(x)=1, x<b;\ \ \mu_{\widetilde{b}}(x)=\frac{c-x}{c-b}, x\in[b,c];$$
$$\mu_{\widetilde{b}}(x)=0, x>c. \qquad (4)$$

Використаємо прості числа для комп'ютерного моделювання нечітких дійсних чисел, базуючись на представленні довільних дійсних чисел у форматі IEEE 754 [5].

Припустимо, що для подання дійсних чисел використовуються n-байтні двійкові представлення. Це означає, що будь-яке дійсне число $x\in R$ може бути подане у двійковому вигляді

$$x=\left[\underset{1\,bit}{s}\,|\,\underset{p\,bit}{characteristic}\,|\,\underset{q\,bit}{mantissa}\right], \qquad (5)$$

де $s=\begin{cases}0, x\ge0\\1, x<0\end{cases}$ - знак числа x, $characteristic=k+BIAS$ - зміщений порядок, k - порядок числа x за основою 2 (степінь, до якої необхідно піднести число 2, щоб виконувалась умова $m=|x|*2^k\in[1,2)$), $BIAS>0$ - деяка константа, величина якої обчислюється за формулою $BIAS=2^{p-1}-1$ [5], $mantissa=m-1$ - мантиса числа x без уявної одиниці, p та q - відповідно кількості розрядів для представлення характеристики та мантиси числа x, $(p+q+1)/8=n$.

Зауважимо, що у представленні (5) характеристика та мантиса визначаються полями двійкових цифр, які є записами деяких цілих чисел. Використаємо поняття нечіткого цілого числа для знаходження діапазону представлення нечіткого трикутного дійсного числа.

Означення 3. Нечітким цілим числом $\widetilde{v}$ будемо називати впорядковану трійку чисел *(u, v, w)*, $u\le v\le w$, $u,v,w\in Z$, де

$$u=\begin{cases}P_{-1}(v), v\ge0,\\-P_1(-v), v<0,\end{cases}\quad w=\begin{cases}P_1(v), v\ge0,\\-P_{-1}(-v), v<0,\end{cases} \qquad (6)$$

а $P_1(\cdot), P_{-1}(\cdot)$ - наступне та попереднє прості числа відносно v, $v\ge0$, та $-v$, $v<0$.

Іншими словами, довільне нечітке ціле число $\widetilde{v}$ може бути представлене у вигляді триплету, ліве (u) та праве (w) значення якого подаються найближчими простими числами.

Розглянемо довільне дійсне число b. Припустимо, що мантиса числа b дорівнює m, порядок числа за основою 2 рівний k. Представимо нечітке дійсне число $\widetilde{b}$ у вигляді трійки *(a, b, c)*, де діапазон представлення $[a,c]$

визначається за допомогою дійсних чисел a та c, які можна отримані, виходячи з формату (5). Для цього визначимо нечітке ціле число $\tilde{m}$ у вигляді впорядкованої трійки цілих чисел (m_a, m, m_c), де m_a та m_c обчислюються за формулами (6). Розглядаючи далі величини m_a та m_c як мантиси деяких дійсних чисел заданого порядку k за основою 2 обчислимо два числа a та c, що визначатимуть діапазон представлення $[a,c]$.

Значення m_a та m_c дозволяють також визначити кількість проміжних чисел $b_i \in [a,c]$, $i \in I$, що використовуються для формалізації нечіткого дійсного числа $\tilde{b}$. Множина індексів у цьому випадку задається діапазоном $I = \overline{0, m_c - m_a}$, а величини мір належності проміжних значень визначаються на основі лінійних функцій (2).

Таким чином, двійкове представлення чисел у форматі (5) дозволяє досить конструктивно визначати нечіткі дійсні числа. Однак, є випадок, що потребує більш детальної уваги. Якщо число b є степенем числа 2 зі знаком плюс або мінус, то мантиса у представленні (5) для такого числа дорівнює 0. У цьому випадку нечітке представлення дійсного числа у вигляді трійки чисел *(a, b, c)* може бути записане як ліве нечітке трикутне число (a,b,b) для від'ємного b, або як праве нечітке трикутне число (b,b,c) для додатного b.

При цьому необхідно звернути увагу на одну важливу деталь. Відомо, що обчислення простих чисел з великими номерами відносно довільного $z \geq 0$ є досить ресурсоємким процесом. В той же час, знаходження найближчих простих чисел $P_1(z)$ та $P_{-1}(z)$ для довільного $z \geq 0$ відбувається дуже швидко і не вимагає суттєвих обчислювальних витрат.

Для демонстрації методики представлення нечітких дійсних чисел у вигляді трійок $\tilde{b} = \{(a,b,c)\}$ з лінійною функцією належності (2) розглянемо два дійсних числа 10567.18 та -0.63147. У цьому випадку з точністю 10 знаків після коми маємо відповідно:

$$\tilde{10567.18} = (10567.1748046875, 10567.18, 10567.2138671875),\ m = 2432184,$$
$$m_a = 2432179,\ m_c = 2432219;$$

$$\tilde{-0.63147} = (-0.6314701438, -0.63147, -0.6314679980),\ m = 2205701,$$
$$m_a = 2205667,\ m_c = 2205703.$$

В якості практичного застосування введеного представлення нечіткого дійсного числа можна навести різні приклади. Серед них, однак, особливо хотілося б відзначити один, в якому безпосередньо використовується нечітке подання довільного числа.

Розглянемо алгоритм для узагальненого шифрування з відкритим та закритим ключами на основі алгоритму рюкзака, розроблений Ральфом Мерклом та Мартином Хелманом [6]. Основна ідея даного алгоритму полягає у створенні закритого ключа, який є перетвореною послідовністю ваг задачі про рюкзак спеціального вигляду, побудові на його основі відкритого ключа $K = \{r_j, j = \overline{1,n}\}$ та проведенні процесу шифрування довільної вхідної інформації. Не заглиблюючись у подробиці, відмітимо, що перетворення закритого ключа у відкритий проводиться за допомогою двох взаємно простих чисел M та N та нескладних математичних операцій з ними. В якості суттєвого покращення криптостійкості базового алгоритму Меркла-Хелмана є модифікація, у якій відкритий ключ доповнюєтьсяи двома довільними цілими значеннями k та l, $k \leq l$, $k = 0,1,2,...$, $l = 1,2,3,...$, за якими з послідовності простих чисел визначаються величини $s = P_k(z)$, $t = P_l(z)$ для деякого числа $z \geq 0$. За допомогою значень s та t можна змінити ваги відкритого ключа та величини N та M, наприклад, за наступною схемою:

- для чисел M та N, які є взаємно простими числами, обчислюються числа $P_s(M)$ та $P_t(N)$ відповідно, де $s = P_k(z)$, $t = P_l(z)$;

- для цілих чисел $r_j \in K, j = \overline{1,n}$, які входять до ключа K, обчислюються величини $u_j = P_s(r_j) - r_j$ та $v_j = P_t(r_j)$, $j = \overline{1,n}$, $s = P_k(z)$, $t = P_l(z)$;

- формується вектор пар елементів $\overline{K} = \{(u_1, v_1), ..., (u_n, v_n)\}$, який буде новим значенням відкритого ключа *K.* Величини $P_s(M)$, $P_t(N)$ та вектор $\overline{K}$ передаються отримувачу повідомлення разом з зашифрованим за допомогою елементів v_j, $j = \overline{1,n}$, повідомленням.

Як вже було сказано вище, обчислення простих чисел, суттєво віддалених від заданого $z \geq 0$, вимагає певного часу, що сповільнює процеси шифрування та розшифрування

повідомлень. Наведений у статті спосіб нечіткого представлення дійсних чисел у формі триплетів дозволяє спростити схему модифікації алгоритму Меркла-Хелмана без зміни рівня його захищеності.

Припустимо, що задано довільне число $z \geq 0$. Використовуючи його нечітке подання можна отримати три цілих числа – два взаємно простих $P_1(x)$ та $P_{-1}(x)$, де x - зміщений порядок у двійковому представленні числа z, та число m, яке є мантисою числа z.

Використовуючи в якості чисел N та M відповідно $P_1(x)$ та $P_{-1}(x)$, можна записати схему модифікації у наступному вигляді:

- з допомогою чисел $M = P_{-1}(x)$ та $N = P_1(x)$, які є взаємно простими числами, обчислюються значення елементів відкритого ключа $r_j \in K, j = \overline{1,n}$;

- отримані значення збільшуються на m: обчислюються величини $u_j = r_j + m$, $j = \overline{1,n}$;

- формується вектор значень елементів $\overline{K} = \{u_1, ..., u_n\}$, який буде новим значенням відкритого ключа *K*.

При цьому для параметризації цього алгоритму шифрування необхідно визначення лише початкового числа $z \geq 0$. Його двійкове представлення дозволяє отримати числа N, M та m для створення/модифікації відкритого ключа і проведення шифрування/розшифрування вхідних повідомлень.

Висновки. Запропонований підхід дає можливість моделювати нечітке подання довільного числа, не визначаючи діапазону представлення. Дане нечітке представлення враховує точність і величину дійсного числа, з урахуванням чого формується множина проміжних значень, що використовуються для формалізації нечіткого дійсного числа. Чисельні експерименти дозволяють говорити про конструктивність і ефективність розглянутого алгоритму.

На завершення варто зазначити, що у випадках, коли діапазон на основі представлення не задовольняє дослідника, можна використати суб'єктивне визначення трикутного вигляду нечіткого дійсного числа.

Список використаних джерел

1. *Івохін Є.В.* Про застосування спеціальних множин простих чисел для визначення міри належності нечітких множин/ Є.В.Івохін// Журнал обчислювальної та прикл. математики. – 2013. – №4. – С.11-18.
2. *Івохін Є.В.* Про застосування простих чисел для визначення міри належності нечітких цілих чисел/ Є.В.Івохін // Журнал обчислювальної та прикл. математики. – 2014. – №1. – С.1-8.
3. *Zadeh L. A.* Fuzzy sets // Inf. Contr. – 1965. – 8. – P. 338-353.
4. *Bablu Jana, Tapan Kumar Roy.* Multi-Objective Fuzzy Linear Programming and Its Application in Transportation Model/ Bablu Jana, Tapan Kumar Roy.// Tamsui Oxford Journal of Mathematical Sciences. – 2005. – 21(2). – P.243-268.
5. Стандарт *IEEE 754* представлення чисел з плаваючою крапкою [Електронний ресурс]. Режим доступу: http://www.h-schmidt.net/FloatConverter/IEEE754.html
6. *Merkle R.* Hiding information and signatures in trapdoor knapsacks/ R.Merkle, M. Hellman //IEEE Trans. Inform. Theory. – 1978. – 24(5). – P.525-530.

References

1. IVOHIN E. (2013) *On the application of specific sets of simple numbers to determine the membership measure of fuzzy sets*. Journ.Comp.&Appl.Math. 4. p.11-18.
2. IVOHIN E. (2014) *On the application of simple numbers to determine the membership measure of fuzzy integers*. Journ.Comp.&Appl.Math. 1. p.31-38.
3. ZADEH L. (1965) *Fuzzy sets*. Inf. Contr. 8. p. 338-353.
4. BABLU J. AND TAPAN K. R. (2005) *Multi-Objective Fuzzy Linear Programming and Its Application in Transportation Model.* Tamsui Oxford Journal of Mathematical Sciences. 21(2). p.243-268.
5. IEEE 754 of floating point representation [Online]. Available from: http://www.h-schmidt.net/FloatConverter/IEEE754.html
6. MERKLE R., HELLMAN M. (1978). *Hiding information and signatures in trapdoor knapsacks.* IEEE Trans. Information Theory. 24(5). p.525-530.

Надійшла до редколегії 15.05.2014

УДК 517.9

Івохін Є.В. [1], д.ф.-м.н, доцент,
Аджубей Л.Т. [2], к.ф.-м.н, доцент

Про розв'язок однієї дворівневої моделі виробничо-транспортної задачі

[1,2] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, м.Київ, пр-т Глушкова, 4д, e-mail: ivohin@univ.kiev.ua

Ivohin E.V. [1], Dr.Sci.,
Adzhubey L.T. [2], Ph.D.

About solution of one two-level production-transportation problem

[1,2] Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: ivohin@univ.kiev.ua

У даній статті розглянуто моделі виробничо-транспортної задачі: загальна модель виробничо-транспортної задачі та модель дворівневої дискретної виробничо-транспортної задачі. Пошук оптимального розв'язку дискретної ВТЗ проведено методом, що використовує ітераційну схему зі штучними змінними. Проведено аналіз отриманих результатів шляхом їх порівняння з аналогічними результатами, які отримано за допомогою алгоритму вирішення оптимізаційних задач лінійного програмування для кожного окремого рівня.

Ключові слова: виробничо-транспортна задача, дворівнева модель, розподіл ресурсів.

In this article it is considered two models of production-transportation problem: a general model of production and transportation problem and the discrete two-level model of production and transportation problem. It is carried out the transformation of original problem to a two-level optimization problem. Finding of the optimal solution of production-transportation problem was obtained by using an iterative scheme with artificial variables. A modification of the algorithm is allowed for the discrete production-transportation problem. Given algorithm for solving the optimization problem is used to solve the problem of distribution of limited resources of data channels capacity between providers and users of computer networks. The analysis of the results is provided by comparing them with the results that are obtained by solving optimization algorithm for linear programming problems for each level. This method allowed to develop an approach for the solution of the linear optimization problems with fuzzy parameters.

Key words: production and transport problem, two-level model, resources distribution.

Статтю представив д.т.н., проф. Волошин О.Ф.

Принципи блочної оптимізації [1] спрощують аналіз, вирішення та змістовні висновки багатьох задач планування та управління. Завдяки таким методам можна розбити складну виробничо-транспортну задачу (ВТЗ) на автономні задачі планування виробництва і організації доставки продукції. При цьому, зрозуміло, виникає необхідність в ітеративному узгодженні інтересів виробничої і транспортної систем. З іншого боку, інтерпретація отриманих результатів у змістовних термінах достатньо часто дозволяє визначити раціональні підходи функціонування різних економічних та технічних систем [2].

Поняття про виробничо-транспортну задачу. Традиційна виробничо-транспортна задача полягає у визначенні плану виробництва та перевезень, що мінімізує сумарні витрати, котрі позв'язані з організацією виробництва та транспортування виробленої продукції до пунктів споживання.

Модель планування, виробництва та перевезень формалізується у вигляді загальної схеми, що містить 2 групи змінних:

$$f(z)+g(x)\to\min, \tag{1}$$

$$Az+Bx=b, \tag{2}$$

де

$$x\in X,\ z\in Z, \tag{3}$$

A, B - задані матриці, $f(z), g(x)$ - неперервні опуклі функції, X, Z - деякі опуклі обмежені множини.

Для розв'язання задачі (1)-(3) у [2] запропоновано ітеративний процесс, на кожному кроці якого вирішуються задачі, що містять лише одну з двох груп змінних:

$$f(z)-vAz\to\min, \tag{4}$$

$$z\in Z \tag{5}$$

та

$$g(x)\to\min \tag{6}$$

$$Bx=b-Az, \tag{7}$$

$$x\in X. \tag{8}$$

©Є.В.Івохін, Л.Т.Аджубей, 2014

Вектор v у задачі (4),(5) має допоміжний сенс і уточнюється в результаті вирішення задачі (6)-(8).

Припустимо, що z^s та v^s - наближення векторів z та v, що отримані на ітерації з номером s, $s = 0,1,2,\ldots$.

Тоді ітеративні процеси

$$z^{s+1} = (1-\lambda_s)z^s + \lambda_s \bar{z}^s, \quad (9)$$

$$v^{s+1} = (1-\lambda_s)v^s + \lambda_s \bar{v}^s, \quad (10)$$

де $0 \le \lambda_s \le 1$, $\lambda_s \to 0$, $s = 0,1,2,\ldots$, $\sum_{s=0}^{\infty} \lambda_s = \infty$,

$\bar{z}^s$ - розв'язок задачі (4), (5) при $v = v^s$, $\bar{v}^s$ - вектор оптимальних оцінок умов (7) при $z = z^s$, збігаються відповідно до розв'язку задачі (1)-(3) і до вектора v^* оптимальних оцінок умов (2) [1].

Далі розглянемо цю задачу більш детально. Припустимо, що виробники продукції (кількість яких N) можуть використати декілька способів виробництва (S), кожен з яких характеризується різною кількістю товарів, а також різною вартістю виробництва і максимально можливим обсягом товарів певного типу. Будемо вважати, що виробники (постачальники) забезпечують споживачів (у кількості M) одним видом товару, і питома вартість перевезень від постачальників до споживачів є відомою. Кожен споживач може задовольняти свої потреби у товарі за допомогою довільного набору виробників.

Таким чином, виробничо-транспортна задача складається з визначення плану виробництва та плану перевезень з мінімальними транспортними витратами з метою повного задоволення попиту споживачів.

Позначимо:

c_{ik}^p - питома вартість виробництва продукції *i*-им виробником за допомогою *k*-го способу;

c_{ij}^t - питома вартість перевевень продукції від *i*-го виробника *j*-му споживачу;

b_j - величина попиту *j*-го споживача;

a_{ik} - кількість продукції, виготовленої *i*-им виробником *k*-им способом;

z_{ik} - інтенсивність використання *k*-го способу *i*-им виробником протягом частини періоду, який приймається рівним 1;

x_{ij} - кількість продукції, перевезеної *i*-им виробником *j*-му споживачу;

$i = \overline{1,N}$, $j = \overline{1,M}$, $k = \overline{1,S}$.

Тоді виробничо-транспортна задача (1)-(3) може бути записана у вигляді дворівневої задачі оптимізації [3]:

$$f(z) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{S} c_{ik}^p z_{ik} \to \min \quad (11)$$

за умов

$$g(x) = \sum_{j=1}^{M}\sum_{i=1}^{N} c_{ij}^t x_{ij} \to \min \quad (12)$$

при обмеженнях

$$\sum_{i=1}^{N} x_{ij} = b_j, \ j = \overline{1,M}, \quad (13)$$

$$\sum_{j=1}^{M} x_{ij} \le \sum_{k=1}^{S} a_{ik} z_{ik}, \ i = \overline{1,N}, \quad (14)$$

$$\sum_{k=1}^{S} z_{ik} \le 1, \ i = \overline{1,N}, \quad (15)$$

$$z_{ik} \ge 0, \ x_{ij} \ge 0, \ i = \overline{1,N}, \ j = \overline{1,M}, \ k = \overline{1,S}. \quad (16)$$

Це означає, що виробництво та транспортування продукції повинно бути організовано таким чином, щоб забезпечити мінімальні витрати виробництва за умов (12)-(16), при якому виникає проблема отримання плану перевезень мінімальної вартості (12) з урахуванням обмежень (13)-(16).

Дискретна модель ВТЗ. Нехай кожен споживач може задовольнити свою потребу у продукції тільки за рахунок одного виробника.

Додамо змінні $y_{ij} = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}$, $i = \overline{1,N}$, $j = \overline{1,M}$, при чому $y_{ij} = 1$, якщо потреби *j*-го споживача задовольняє *i*-ий виробник, і $y_{ij} = 0$, в усіх інших випадках.

Отримуємо дворівневу неперервно-дискретну задачу лінійного програмування такого вигляду:

$$f(z) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{S} c_{ik}^p z_{ik} \to \min \quad (17)$$

за умов

$$g(x) = \sum_{j=1}^{M}\sum_{i=1}^{N} c_{ij}^t b_j y_{ij} \to \min \quad (18)$$

при обмеженнях

$$\sum_{i=1}^{N} y_{ij} = 1, \ j = \overline{1,M}, \quad (19)$$

$$\sum_{j=1}^{M} b_j y_{ij} \le \sum_{k=1}^{S} a_{ik} z_{ik}, \ i = \overline{1,N}, \quad (20)$$

$$\sum_{k=1}^{S} z_{ik} \le 1, \ i = \overline{1,N}, \quad (21)$$

$$z_{ik} \ge 0, \ y_{ij} = \{0,1\}, \ i = \overline{1,N}, \ j = \overline{1,M}, \ k = \overline{1,S}. \quad (22)$$

В роботі [3] пропонується вирішувати цю задачу за наступною схемою:

- вирішується задача верхнього рівня (17), (19)-(22);

- фіксується розв'язок $z=\{z_{ik}\}$, $i=\overline{1,N}$, $k=\overline{1,S}$;

- вирішується задача нижнього рівня (18)-(22).

Оскільки значення цільової функції верхнього рівня не залежить від рішення нижнього рівня, і навпаки, цей алгоритм буде знаходити оптимальні рішення і значення відповідних функцій цілей для задач лінійного програмування обох рівнів. На першому кроці роботи алгоритму отримується допустимий розв'язок, який буде оптимальним розв'язком задачі верхнього рівня. Дійсно, якщо z^0 не є оптимальним розв'язком першої задачі, тоді існує інший розв'язок z^1, що має краще значення функції (17), що суперечить результату, отриманому на першому кроці. Тому z^0 є оптимальним розв'язком. Враховуючи це рішення, на третьому кроці отримується оптимальний розв'язок для задачі нижнього рівня.

Алгоритм розв'язання ВТЗ. Наведена схема для знаходження розв'язку дискретної виробничо-транспортної задачі, незважаючи на простоту, має досить узагальнений вигляд.

Для створення ефективного способу розв'язання отриманої вище оптимізаційної дискретної ВТЗ (17)-(22) проведено модифікацію загального методу вирішення задачі вигляду (1)-(8) з урахуванням особливостей задачі (17)-(22). Не враховуючи особливостей розв'язання дискретних задач оптимізації, для пошуку оптимального розв'язку дворівневої ВТЗ (17)-(22) пропонується використати ітераційну схему типу (9)-(10).

Позначимо як і раніше $z^s=\{z_{ik}^s\}$, $i=\overline{1,N}$, $k=\overline{1,S}$ та $v^s=\{v_i^s\}$, $i=\overline{1,N}$, - наближення розв'язків z та v дискретної ВТЗ (17)-(22), що отримані на ітерації з номером s, $s=0,1,2,\ldots$.

Тоді ітеративні процеси (9)-(10) можна записати у вигляді:

0 крок. Покладемо $s=0$, $\lambda_0=1/2$; $v_i^0=0$; $i=\overline{1,N}$, $Eps>0$. Задамо довільне початкове z^0.

s-ий крок. 1.Розв'язується задача верхнього рівня

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{S}(c_{ik}^p-a_{ik}v_i^s)z_{ik}\to\min,$$

з обмеженнями

$$\sum_{j=1}^{M}b_j y_{ij}\le\sum_{k=1}^{S}a_{ik}z_{ik},\ i=\overline{1,N},$$

$$y_{ij}\in\{0,1\},\ z_{ik}\ge 0,\ i=\overline{1,N},\ j=\overline{1,M},\ k=\overline{1,S};$$

Позначимо $\bar{z}^s=\{\bar{z}_{ik}^s\}$, $i=\overline{1,N}$, $k=\overline{1,S}$, - розв'язок задачі, обчислимо $\bar{v}_i^s=\sum_{k=1}^{S}a_{ik}\bar{z}_{ik}^s$, $i=\overline{1,N}$.

2. Розв'язується задача нижнього рівня

$$\sum_{j=1}^{M}\sum_{i=1}^{N}c_{ij}^r x_{ij}\to\min,$$

з обмеженнями

$$\sum_{j=1}^{M}x_{ij}\le\bar{v}_i^s,\ i=\overline{1,N},$$

$$x_{ij}\ge 0,\ i=\overline{1,N},\ j=\overline{1,M};$$

Позначимо розв'язок задачі $x^s=\{x_{ij}^s\}$, $i=\overline{1,N}$, $j=\overline{1,M}$.

3. Обчислюються нові наближення z та v

$z^{s+1}=(1-\lambda_s)z^s+\lambda_s\bar{z}^s$, $v^{s+1}=(1-\lambda_s)v^s+\lambda_s\bar{v}^s$.

Збільшується s та перераховується λ_s: $s=s+1$, $\lambda_s=1/(s+2)$.

Якщо для наближення z^{s+1} справедлива нерівність $\left\|z^{s+1}-z^s\right\|<Eps$, то обчислення завершуються. Інакше переходимо до пункту 1 наступної ітерації.

Умови $0\le\lambda_s\le 1$, $\lambda_s\to 0$, $s=0,1,2,\ldots$, $\sum_{s=0}^{\infty}\lambda_s=\infty$, виконуються. Тому, як вже було сказано вище, послідовність z^s, $s=0,1,2,\ldots$, збігається до оптимального розв'язку виробничої задачі (17)-(22), а послідовність x^s, $s=0,1,2,\ldots$, відповідно, – до оптимального розв'язку транспортної задачі (18)-(22).

Даний алгоритм був запропонований для розв'язання задачі ефективного розподілу потужностей каналів передачі даних між вузлами мережі провайдерів та користувачів з урахуванням потреб і переваг абонентів, так і можливостей провайдерів. Передбачається, що відомі необхідні обсяги абонентів мережі в отриманні тих чи інших типів інформації. Задано побажання (переваги) абонентів і можливості провайдерів щодо відносної здатності по передачі різного типу інформації тому чи іншому абоненту або вузлу. Визначено умови оцінювання ефективності розподілу каналів (відносно їх пропускної здатності). Структуру мережі та інформації, що розподіляється у ній,

визначено виробничо-транспортну задачу з лінійними функціями цілі та деякими конструктивними обмеженнями:

- інформація розподіляється від провайдера до абонентів через комутаційні вузли за постійно підключеними каналами зв'язку;
- кожен вузел або абонент мережі обслуговується одним або декількома комутаційними вузлами;
- кількість інформації, що розподіляється, для комутаційних узлов та абонентів може бути обмеженою як зверху (принципові обмеження можливостей провайдера), так і знизу (мінімальна потреба абонентів у необхідній информации).

Ця задача відома як задача розподілу обмежених ресурсів каналів передачі даних, що відноситься до ієрархічних задач оптимізації, і розглядалась раніше як транспортна задача з проміжними пунктами (трьохіндексна транспортна задача) [4] та задача визначення оптимальних потоків у мережі [5].

Використання запропонованого підходу дозволило отримати розв'язок поставленої задачі як виробничо-транспортної задачі. Для порівняння результатів оптимізації розподілу потужностей каналів передачі даних за допомогою алгоритму розв'язання дискретної ВТЗ з іншими способами був отриманий розв'язок цієї ж задачі як трьохіндексної транспортної задачі. Не зосереджуючись на чисельних результатах, необхідно відмітити, що було отримано близькі результати, при чому з достатньо високою обчислювальною ефективністю, що говорить про конструктивність застосування запропонованого алгоритму в оптимізаційних задачах з двома рівнями формалізації.

Висновок. У даній статті розглянуто моделі виробничо-транспортної задачі: загальна модель виробничо-транспортної задачі та модель дворівневої дискретної виробничо-транспортної задачі. Пошук оптимального розв'язку отриманої дискретної ВТЗ проведено методом, що використовує ітераційну схему зі штучними змінними. Проведено аналіз отриманих результатів шляхом їх порівняння з аналогічними результатами, які отримано за допомогою алгоритму вирішення оптимізаційних задач лінійного програмування для кожного окремого рівня.

Список використаних джерел

1. *Юдин Д.Б.* Экстремальные модели в экономике/ Д.Б.Юдин, А.Д.Юдин. – М.: Экономика, 1979. – 288с.
2. *Волконский В.А.* Принципи оптимального планирования/ В.А.Волконский. – М.: Экономика, 1973. – 216с.
3. *Lukac, Z., Hunjet D. and Neralic L.* (2008) Solving the production-transportation problem in the Petroleum Industry// Revista Investigacion Operacional. V.29. №1. p.63-70.
4. *Раскин Л.Г.* Многоиндексные задачи линейного программирования/ Л.Г. Раскин, И.О.Кириченко. – М.: Радио и связь, 1982. – 240с.
5. *Прилуцкий М.Х.* Потоковые алгоритмы распределения ресурсов в иерархических системах / М.Х.Прилуцкий, А.Г. Картомин // Исследовано в России. – 2003. – 39. – С. 444-452. – Режим доступу до журн. http://zhurnal.ape.relarn.ru/ articles/2003/039.pdf

References

1. YUDIN D. and YUDIN A. (1979) *Extreme models in economics.* Moskva: Economika.
2. VOLKONSKII V. (1973) *Principles of optimal planning.* Moskva: Economika.
3. LUKAC, Z., HUNJET D. and NERALIC L. (2008) Solving the production-transportation problem in the Petroleum Industry//*Revista Investigacion Operacional.* V.29. №1. pp.63-70.
4. RASKIN L. and KIRICHENKO I. (1982) *Multiindex linear programming problems* – Moskva: Radio and communication.
5. PRILUCKII M. and KARTOMIN A. (2003) Flow algorithms of resources distribution in hierarchical system. *Research in Russia* [Online] 39. p.444-452. – Available from: http://zhurnal.ape.relarn.ru/ articles/2003/039.pdf

Надійшла до редколегії 16.05.2014

УДК 519.2

Какойченко А.І.[1], студент

Особливості використання стратегії статистичного арбітражу

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

A.I. Kakoichenko[1], student

Features of statistical arbitrage strategy

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova av., 4d, e-mail: a.kakoychenko@gmail.com

У роботі проводиться розробка алгоритму перевірки і удосконалення ринково-нейтральних стратегій статистичного арбітражу з урахуванням усіх особливостей російського фондового ринку. Також наведено його застосування із використанням історичних даних Московської біржі.

Ключові слова: фондовий ринок, статистичний арбітраж, алгоритм, ринково-нейтральні стратегії

Statistical arbitrage strategies are generally known for attractive investment properties, such as low exposure to the equity markets and relatively low volatility. An algorithm of validation and improvement of market-neutral strategies of statistical arbitrage with all the features of the Russian stock market is being researched in this paper. An example of this algorithm application within historical data of the Moscow Exchange is being proposed. The process of model developing and testing required specialized computer simulation software. For this purposes I used the original program "Watcher". I also used the data about transactions (full order log), provided by Moscow Exchange.

Conclusive observations show that arbitrage profitability is in fact present when applying this novel approach to the Russian stock market data. Hence, the results met are not so desirable in comparison with the Western markets due to the low liquidity and very limited set of correlated financial instruments.

Key Words: stock market, statistical arbitrage, algorithm, market-neutral strategies.

Статтю представив д.т.н., проф. Заславський В.А.

Вступ

На даний момент торгівля фінансовими інструментами із застосуванням комп'ютерних алгоритмів набула широкого розповсюдження на світових ринках. Однією з найпопулярніших алгоритмічних стратегій є арбітраж - це стратегія з додатньою ймовірністю отримання прибутку та нульовою ймовірністю отримання збитку за обмежений час. Через низьку прибутковість арбітражу часто використовується статистичний арбітраж - це стратегія з додатньою ймовірністю отримання прибутку та нульовою ймовірністю отримання збитку за необмежений час.

Як правило, статистичний арбітраж являє собою одночасну купівлю однієї множини активів та продаж іншої множини активів, причому кореляція між прибутковістю першої та другої множин має бути близькою до одиниці.

Парна торгівля є добре відомим методом, розробленим командою науковців, очолюваною Nunzio Tartaglia, див Gatev et al. (2006). Стратегія широко описана в сучасній літературі в тому числі Enders and Granger (1998), Vidyamurthy (2004), Dunis and Ho (2005), Lin et al. (2006) and Khandani and Lo (2007).

У 2010 році британські вчені у роботі Statistical Arbitrage and High-Frequency Data with an Application to Eurostoxx 50 Equities [1] розглянули стратегію статистичного арбітражу та її прибутковість на європейських ринках. Автори відбирали дві акції з високою кореляцією з одного сектору економіки, потім підбирали параметри стратегії на in-sample даних, після чого перевіряли ефективність на out-of-sample даних.

Для визначення співвідношення між акціями використовувалися такі методи згладжування, як МНК, DESP та Фільтр Калмана.

Ефективність стратегії оцінювалася за допомогою таких характеристик, як прибутковість та коефіцієнт Шарпа (більш докладно про цю характеристику у розділі математична модель).

Фільтр Калмана показав значно кращі результати, ніж два інших підходи, тому я буду

© А.І. Какойченко, 2014

використовувати саме його для визначення рівноважного відношення між акціями.

Автори дійшли висновку, що статистичний арбітраж має значні перспективи на європейських біржах, і навіть досить примітивна стратегія дає хороший прибуток при незначних ризиках.

Математична модель

Коефіцієнт Шарпа — показник ефективності інвестиційного портфелю (активу), який розраховується, як відношення середньої премії за ризик до середнього відхилення портфелю.

$$S = \frac{E[R - R_f]}{\sigma} = \frac{E[R - R_f]}{\sqrt{Var[R - R_f]}},$$

де

R - прибутковість портфелю (актива);

R_f - безризикова відсоткова ставка;

$E[R - R_f]$ - математичне сподівання перевищення прибутковості портфелю над безризиковою відсотковою ставкою;

σ - стандартне відхилення прибутковості портфелю (актива);

Якщо R_f є константою впродовж усього періоду, то $\sqrt{Var[R - R_f]} = \sqrt{Var[R]}$.

Фільтр Калмана, також відомий як лінійно-квадратична оцінка (LQE), є алгоритмом, який використовує серію спостережень, які містять шум (випадкові величини) та інші неточності, а також пропонує оцінки невідомих змінних, які мають тенденцію бути більш точним, ніж ті, які засновані на одному вимірі в спокої. Більш формально, фільтр Калмана працює рекурсивно на зашумлених потоках вхідних даних для отримання статистично оптимальної оцінки базового стану системи. Фільтр названий на честь Рудольфа Е. Калмана, одного з основних розробників цієї теорії.

Алгоритм працює в два етапи. На кроці прогнозування фільтр Калмана розраховує оцінку поточної змінної стану, а також її невизначеності. Як тільки результат наступного вимірювання спостерігається, ці оцінки коректуються. Через рекурсивність алгоритму, він може працювати в режимі реального часу, використовуючи тільки поточні вимірювання вхідних даних і розрахованих раніше станів; жодної додаткової інформації не потрібно.

З теоретичної точки зору, основне припущення фільтру Калмана є те, що система є лінійною динамічною системою, і що всі помилки і вимірювання мають гауссівський розподіл (часто багатовимірний гауссівський розподіл).

Також, відомі деякі розширення та узагальнення методу. Наприклад, фільтр Калмана для нелінійних систем.

Особливістю фільтра Калмана є підсилення вхідного сигналу. Коефіцієнт підсилення Калмана є функцією відносно достовірності вимірювань і поточної оцінки стану, і може бути "налаштований", щоб досягти конкретного результату. З високим коефіцієнтом підсилення фільтр надає більшу вагу вимірам, ніж прогнозу, і дає значення близькі до останнього виміру. З низьким коефіцієнтом підсилення фільтр надає більшої ваги прогнозу, згладжуючи шум, однак при цьому зменшується чутливість. Коефіцієнт підсилення, рівний одиниці, змушує фільтр ігнорувати оцінку стану повністю, в той час як при посиленні, яке дорівнює нулю, вимірювання повинні бути проігноровані.

Базова динамічна модель системи

Фільтр Калмана базується на лінійних динамічних системах дискретизації в часовій області. Вони моделюються на ланцюгу Маркова, побудованому на лінійних операторах, збурених гауссівським шумом. Стан системи представлено у вигляді вектора дійсних чисел. На кожному прирості дискретного часу лінійний оператор застосовується до стану для створення нового стану з деяким шумом. Потім інший лінійний оператор, змішаний з більшою кількістю шуму, генерує виходи зі справжнього («прихованого») стану. Фільтр Калмана можна розглядати, як аналог прихованої марківської моделі з ключовою відмінністю, що приховані змінні стану приймають значення у неперервному просторі (на відміну від дискретного простору станів, як у прихованій марківській моделі).

Особливості моделі фільтра Калмана

Для перевірки стратегій використовуватимемо програму Amibroker. Увесь програмний код, що буде поданий нижче, написаний на вбудованій мові AFL.

Коефіцієнт beta знаходимо використовуючи фільтр Калмана.

Специфікація моделі фільтра Калмана

$$\beta_{t|t-1} = \beta_t$$

$$\nu_t = Y_t - X_t\beta_t$$

$$F_t = X_t P_t X_t' + H$$

$$\beta_{t+1} = \beta_t + P_t X_t' \frac{\nu_t}{F_t}$$

$$P_{t+1} = P_t - P_t X_t' X_t P_t \frac{1}{F_t} + Q$$

Параметри моделі H та Q. Рівень шуму, що визначається, як Q/H, є найважливішим параметром системи. Чим він вищий, тим бета більш адаптивна. При дуже малому рівні шуму бета буде фіксованою.

Початкове бета беремо $\beta_1 = \frac{Y_1}{X_1}$, бо тоді початкова похибка дорівнює 0.

Модель парного трейдингу

За допомогою фільтра Калмана знаходимо спред між інструментами $z_t = P_{Y_t} - \beta_t P_{X_t}$, де z_t є величиною спреду в час *t*, P_{X_t} - ціна інструменту *X* в момент часу *t*, P_{Yt} –ціна інструменту *Y* в момент часу *t*. β_t – адаптивний коефіцієнт, розрахований фільтром Калмана в момент часу t.

Ми купуємо (продаємо) спред, коли він на два середніх відхилення вищий (нижчий) за своє середнє значення. Ми закриваємо позицію, коли відстань між спредом та середнім значенням менша за 0.5 стандартних відхилень.

Якщо позиція тримається більше, ніж nbarstop хвилин, то ліквідуємо її (див. рис. 1).

Оптимізація

Розділимо діапазон даних на in-sample (до 31 січня включно) та out-of-the-sample (1 лютого -13

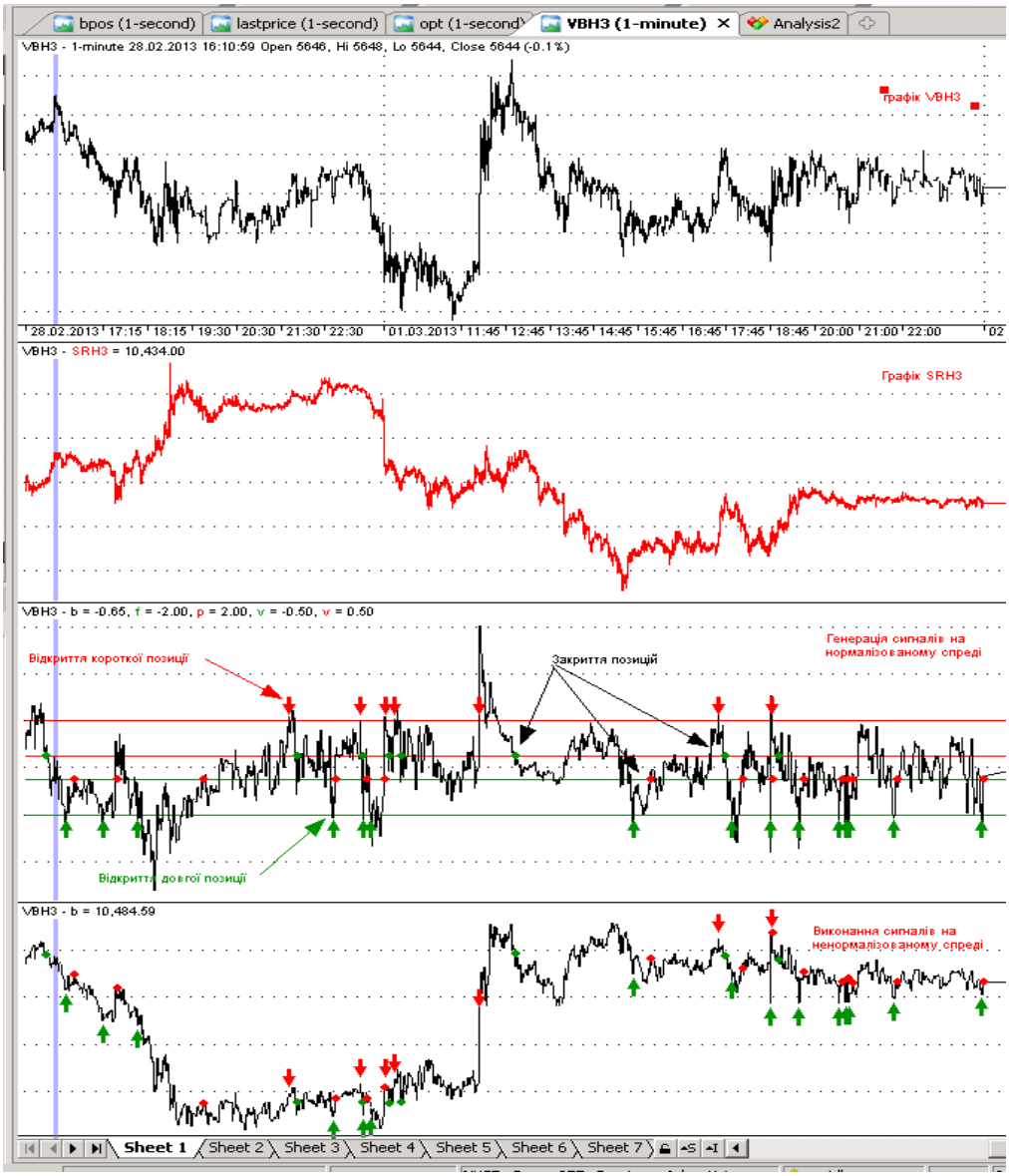


Рис. 1. Візуалізація моделі парного трейдингу.

березня)

Оптимальні параметри, отримані методом генетичної оптимізації, такі:

Пара	Sharpe ratio	Profit %	$Log_{10}H$	period	N bar stop
SR-VB	5,37	3	9	1000	900
LK-GZ	7,86	1.5	10	800	800
SR-RI	2.79	5.64	7	300	900

*Profit вказано для стратегії, яка передбачає повне депонування коштів.

Тестування

Пара	Коеф. Шарпа	Прибуток %
SR-VB	-8	-2,8
LK-GZ	-0.4	-0.08
SR-RI	3.2	3.7

Висновки

На жаль, стратегії, які були прибутковими на європейських ринках у 2010 році, виявилися значно менш ефективними на даних Московської біржі за кінець 2012-початок 2013.

Якщо проаналізувати причини того, що прибуток вдалося отримати лише на найліквідніших інструментах, то можна виділити такі: відносно низька ліквідність інструментів Московської біржі, малий вибір пар корелюючих інструментів, використання даних з точністю до хвилини замість більш точних даних, велика конкуренція алгоритмічних торгових систем, які використовують подібні стратегії**.**

Список використаних джерел

1. *Christian L. Dunis, Gianluigi Giorgioni, Jason Laws, Jozef Rudy* Statistical Arbitrage and High-Frequency Data with an Application to Eurostoxx 50 Equities// Liverpool Business School, CIBEF Liverpool John Moores University, - 2010.
2. *Christian L. Dunis, Gary Shannon* Emerging markets of South-East Asia and Central Asia: Do They Still Offer a Diversification Benefit? // Journal of Asset Management. – 2005. – Vol. 6. – № 3. – P. 168-190.
3. *Hamilton, J.* Time Series Analysis /J. Hamilton – Princeton: Princeton University Press, 1994 – 816pp.
4. *Roweis S. and Ghahramani, Z.* A unifying review of linear Gaussian models //Neural Comput. – 1999. – Vol. 11, № 2, P. 305–345.

References

1. DUNIS, C. et al. (2010) *Statistical Arbitrage and High-Frequency Data with an Application to Eurostoxx 50 Equities*, Liverpool: Liverpool Business School.
2. DUNIS, C., SHANNON, G. (2005) Emerging markets of South-East Asia and Central Asia: Do They Still Offer a Diversification Benefit? *Journal of Asset Management.* 6(3), p.168-190.
3. HAMILTON, J. (2010) *Time Series Analysis*, Princeton: Princeton University Press.
4. ROWEIS, S., GHAHRAMANI, Z. (1999) A unifying review of linear Gaussian models, *Neural Comput.* 11(2). p. 305–345.

Надійшла до редколегії 17.04.2014

УДК 517.9, 519.3

Капустян О.А.[1], к.ф.-м.н.,
Мазур О.К.[2]

Наближене оптимальне керування для рівняння Пуассона з нелокальними крайовими умовами

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова, 4д,
e-mail: olena.kap@gmail.com
[2] Національний університет харчових технологій, 01601 м. Київ, вул. Володимирська, 68,
e-mail: okmazur@ukr.net

O.A. Kapustian[1], PhD,
O.K. Mazur[2]

Approximate optimal control for Poisson equation with nonlocal boundary conditions

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: olena.kap@gmail.com
[2] National University of Food Technologies, 01601, Kyiv, Volodimirska st., 68,
e-mail: okmazur@ukr.net

У роботі розглядається задача мінімізації квадратичного критерію якості на розв'язках еліптичного рівняння з розподіленим керуванням у правій частині, які задовольняють нелокальні крайові умови на границі області. Доведено класичну розв'язність поставленої задачі. Запропоновано та обґрунтовано наближену формулу оптимального керування у термінах коефіцієнтів Фур'є параметрів задачі.

Ключові слова: наближене оптимальне керування, рівняння Пуассона, нелокальні крайові умови, розподілені системи, метод перетворення Фур'є.

In this paper we develop constructive method for finding approximate optimal control for Poisson equation with nonlocal boundary conditions.

As it follows from [1,2], one of the most useful methods to solve linear-quadratic optimal control problems for distributed systems is the Fourier transform method. The similar nonlocal boundary value problem for the Laplace equation in a circular sector was solved in [3]. The corresponding optimal control problem in the class of controls which depend on the angular variable, was solved in [4].

On the basis of these analyses, we prove the classical solvability of the optimal control problem for Poisson equation with distributed control and nonlocal boundary conditions in a circular sector. We propose and substantiate a constructive approximate optimal control formula in terms of the Fourier coefficients of the problem parameters. Finally, we illustrate the method effectiveness with numerical calculations.

Key Words: approximate optimal control, Poisson equation, nonlocal boundary conditions, distributed systems, Fourier transform method.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Хусаінов Д.Я.

Вступ. Одним з методів розв'язання лінійно-квадратичних задач оптимального керування розподіленими системами є метод Фур'є [1,2]. Розглянена в роботі нелокальна крайова задача для рівняння Лапласа в круговому секторі була розв'язана в [3]. Відповідна задача оптимального керування в класі керувань, що залежать лише від кутової змінної, була розв'язана в роботі [4]. У даній роботі доведено класичну розв'язність цієї задачі в класі розподілених керувань. Запропоновано та обгрунтовано конструктивну формулу наближеного оптимального керування в термінах коефіцієнтів Фур'є функції крайових умов. Ефективність методу проілюстровано чисельними розрахунками.

Постановка задачі. У круговому секторі $Q = \{(r,\theta) \mid r \in (0,1), \theta \in (0,\pi)\}$ розглядається задача оптимального керування

© О.А. Капустян, О.К. Мазур, 2014

$$\begin{cases} \Delta y := \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial y}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 y}{\partial \theta^2} = u(r,\theta),(r,\theta)\in Q, \\ y(1,\theta)=p(\theta),\ \theta\in(0,\pi), \\ y(r,0)=0,\ r\in(0,1), \\ \frac{\partial y}{\partial\theta}(r,0)=\frac{\partial y}{\partial\theta}(r,\pi),\ r\in(0,1), \end{cases} \quad (1)$$

$$J(u)=\int_0^1 \|y(r)\|_D^2\,dr+\int_0^1 \|u(r)\|_D^2\,dr\to\inf\ , \quad (2)$$

де $p\in C^1([0,\pi])$, $p(0)=0$ – задана функція, $|\cdot|_D$ – норма в $L^2(0,\pi)$, що задається рівністю

$$\forall v\in L^2(0,\pi),\ |v|_D^2=\sum_{n=1}^{\infty} v_n^2\ ,$$

де $\forall n\le 1$ $\quad v_n=\int_0^{\pi} v(\theta)\psi_n(\theta)d\theta$, $\quad \psi_0(\theta)=\frac{2}{\pi^2}$,

$\psi_{2n}(\theta)=\frac{4}{\pi^2}(\pi-\theta)\sin 2n\theta$, $\psi_{2n-1}(\theta)=\frac{4}{\pi^2}\cos 2n\theta$.

Тут і надалі ми використовуємо біортонормовані та повні в $L^2(0,\pi)$ системи функцій Самарського-Іонкіна [3] $\psi=\{\psi_n\}_{n=0}^{\infty}$, $\Phi=\{\varphi_0(\theta)=\theta,\ \varphi_{2n}(\theta)=\sin 2n\theta,\ \varphi_{2n-1}(\theta)=\theta\cos 2n\theta\}_{n=1}^{\infty}$, які дозволяють розв'язати задачу (1) при $u=0$.

Основною метою роботи є встановлення класичної розв'язності (1)–(2), тобто відшукання оптимального серед допустимих процесів $\{u,y\}\in C(\overline{Q})\times(C(\overline{Q})\cap C^2(Q))$, а також обґрунтування конструктивного методу знаходження наближеного оптимального керування.

Існування розв'язку задачі (1)–(2). Будемо шукати розв'язок задачі (1) $y=y(r,\theta)$ у вигляді

$$y(r,\theta)=\sum_{n=0}^{\infty} y_n(r)\varphi_n(\theta).$$

Тоді задача (1)–(2) зводиться до наступної: на допустимих парах $\{u_n(r),y_n(r)\}_{n=0}^{\infty}$ задачі

$$\frac{d}{dr}\left(r\frac{dy_0}{dr}\right)=r\cdot u_0(r),\ y_0(1)=p_0, \quad (3)$$

$$r\frac{d}{dr}\left(r\frac{dy_{2k-1}}{dr}\right)-(2k)^2 y_{2k-1}=r^2u_{2k-1}(r), \quad (4)$$

$$y_{2k-1}(1)=p_{2k-1},$$

$$r\frac{d}{dr}\left(r\frac{dy_{2k}}{dr}\right)-(2k)^2 y_{2k}-4ky_{2k-1}=r^2u_{2k}(r), \quad (5)$$

$$y_{2k}(1)=p_{2k},$$

де $\forall k\le 0$ $\quad p_k=\int_0^{\pi} p(\theta)\psi_k(\theta)d\theta$, мінімізувати критерій якості

$$J(u)=\int_0^1\left[y_0^2(r)+u_0^2(r)\right]dr+\sum_{k=1}^{\infty}\int_0^1\left[y_{2k-1}^2(r)+y_{2k}^2(r)+\right.$$

$$\left.+u_{2k-1}^2(r)+u_{2k}^2(r)\right]dr=J_0+\sum_{k=1}^{\infty}J_k\ . \quad (6)$$

При цьому оптимальний процес $\{\tilde{u}_n(r),\tilde{y}_n(r)\}_{n=0}^{\infty}$ має бути таким, щоб виконувалися умови:

$$\tilde{u}(r,\theta)=\sum_{n=0}^{\infty}\tilde{u}_n(r)\varphi_n(\theta)\in C(\overline{Q}), \quad (7)$$

$$\tilde{y}(r,\theta)=\sum_{n=0}^{\infty}\tilde{y}_n(r)\varphi_n(\theta)\in C(\overline{Q})\cap C^2(Q). \quad (8)$$

При фіксованих керуваннях $\{u_k(r)\}_{k=0}^{\infty}\subset C([0,1])$ розв'язки задачі (3)–(5) мають вигляд

$$y_0(r)=p_0+\int_0^1 G_0(r,s)u_0(s)ds, \quad (9)$$

$$y_{2k-1}(r)=p_{2k-1}r^{2k}+\frac{1}{4k}\int_0^1 sG_k(r,s)u_{2k-1}(s)ds, \quad (10)$$

$$y_{2k}(r)=p_{2k}r^{2k}+p_{2k-1}r^{2k}\ln r+ \quad (11)$$

$$+\frac{1}{4k}\int_0^1 sG_k(r,s)u_{2k}(s)ds+\frac{1}{4k}\int_0^1 s\overline{G}_k(r,s)u_{2k-1}(s)ds,$$

де в $\Pi=[0,1]\times[0,1]$

$$G_0(r,s)=\begin{cases} s\ln r,\ s\in[0,r], \\ s\ln s,\ s\in[r,1], \end{cases}\ \max_{\Pi}|G_0(r,s)|\le e^{-1}, \quad (12)$$

$$G_k(r,s)=\begin{cases} s^{2k}(r^{2k}-r^{-2k},\ s\in[0,r], \\ r^{2k}(s^{2k}-s^{-2k}),\ s\in[r,1], \end{cases}\ \max_{\Pi}|G_k(r,s)|\le 1 \quad (13)$$

а з формули (11) ядро $\overline{G}_k(r,s)$ має вигляд

$$\overline{G}_k(r,s)=\begin{cases} \frac{1}{2k}\left(\left(\frac{s}{r}\right)^{2k}-(rs)^{-2k}\right)+r^{2k}s^{2k}\ln(rs)-\left(\frac{s}{r}\right)^{2k}\ln\frac{s}{r},\ s\in[0,r], \\ \frac{1}{2k}\left(\left(\frac{r}{s}\right)^{2k}-(rs)^{-2k}\right)+r^{2k}s^{2k}\ln(rs)-\left(\frac{r}{s}\right)^{2k}\ln\frac{r}{s},\ s\in[r,1], \end{cases}\quad \max_{\Pi}\left|\overline{G}_k(r,s)\right|\le\frac{1}{k}. \quad (14)$$

Тоді формули (9)–(11) $\forall k \le 0$ визначають $y_k \in C([0,1]) \cap C^2(0,1)$. Крім того, оскільки функціонали $J_0 : L^2(0,1) \to R$, $J_k : L^2(0,1) \times$ $\times L^2(0,1) \to R$ є строго опуклими, неперервними і коерцитивними, то кожна з відповідних оптимізаційних задач має єдиний розв'язок в $L^2(0,1)$. Для його знаходження прирівнюємо до нуля похідні Фреше і одержуємо наступні інтегральні рівняння Фредгольма:

$$u_0(s) = -\int_0^1 \left(\int_0^1 G_0(r,\xi) G_0(r,s) dr \right) u_0(\xi) d\xi - \\ - p_0 \int_0^1 G_0(r,s) dr, \tag{15}$$

для вектора $z_k(s) = \begin{pmatrix} u_{2k-1}(s) \\ u_{2k}(s) \end{pmatrix}$, $k \ge 1$

$$z_k(s) = -\frac{1}{(4k)^2} \int_0^1 A_k(\xi, s) z_k(\xi) d\xi + f_k(s), \tag{16}$$

де

$$A_k(\xi, s) = \xi \cdot s \begin{pmatrix} \int_0^1 \left(G_k(r,s) G_k(r,\xi) + \overline{G}_k(r,s) \overline{G}_k(r,\xi) \right) dr & \frac{1}{2} \int_0^1 \overline{G}_k(r,s) G_k(r,\xi) dr \\ \frac{1}{2} \int_0^1 \overline{G}_k(r,\xi) G_k(r,s) dr & \int_0^1 G_k(r,s) G_k(r,\xi) dr \end{pmatrix}, \tag{17}$$

$$f_k(s) = -\frac{1}{4} \begin{pmatrix} \int_0^1 \left[p_{2k-1} r^{2k} s G_k(r,s) + \left(p_{2k} r^{2k} + p_{2k-1} r^{2k} \ln r \right) s \overline{G}_k(r,s) \right] dr \\ \int_0^1 \left(p_{2k} r^{2k} + p_{2k-1} r^{2k} \ln r \right) s G_k(r,s) dr \end{pmatrix}. \tag{18}$$

Оскільки $\max_{\Pi} \| A_k(\xi, s) \| \le 4$, $\max_{s \in [0,1]} \| f_k(s) \| \le$

$\le \frac{1}{4k^2} \left(| p_{2k-1} | + | p_{2k} | \right)$, то рівняння (15), (16) мають єдиний розв'язок $\tilde{u}_0 \in C([0,1])$, $\tilde{z}_k = \begin{pmatrix} \tilde{u}_{2k-1} \\ \tilde{u}_{2k} \end{pmatrix} \in C([0,1])$, причому $\forall k \ge 1$

$$\max_{r \in [0,1]} | \tilde{u}_{2k-1}(r) | \le \frac{1}{k^2} \left(| p_{2k-1} | + | p_{2k} | \right), \\ \max_{r \in [0,1]} | \tilde{u}_{2k}(r) | \le \frac{1}{k^2} \left(| p_{2k-1} | + | p_{2k} | \right). \tag{19}$$

Тоді за ознакою Вейєрштраса виконується умова (7) і, аналогічно [4], використовуючи гармонічність функцій $r^{2n} \sin 2n\theta$ і $r^{2n} (\ln r \cdot \sin 2n\theta + \theta \cos 2n\theta)$, а також (12)–(14), одержимо виконання умови (8). Тим самим, встановлена однозначна розв'язність задачі (1)–(2).

Наближене оптимальне керування для задачі (1)–(2). Розглянемо рівняння (5)–(6), які однозначно визначають компоненти оптимального керування $\tilde{u}(r, \theta)$. За теоремою Банаха про нерухому точку маємо, що якщо функція $u(s)$ задовольняє інтегральне рівняння

$$u(s) = \int_0^1 A(\xi, s) u(\xi) d\xi + f(s), \tag{20}$$

де A, f – визначені в (17), (18) неперервні функції, для яких $\max_{s \in [0,1]} \| A(\xi, s) \| \le \rho < 1$, $\max_{s \in [0,1]} \| f(s) \| \le L$, то рекурентна процедура

$$u^{(i+1)}(s) = \int_0^1 A(\xi, s) u^{(i)}(\xi) d\xi + f(s), \\ i \ge 0, u^0(s) \equiv 0, \tag{21}$$

визначає рівномірну збіжну на $[0,1]$ до розв'язку рівняння (20) послідовність $\{u^{(i)}(s)\}_{i=0}^{\infty}$, причому швидкість збіжності визначається з умови

$$\max_{s \in [0,1]} \| u(s) - u^{(i)}(s) \| \le \frac{\rho^i}{1 - \rho} \cdot L. \tag{22}$$

Застосуємо цей результат до рівнянь (15), (16), вважаючи, що

$$A(\xi, s) = A_0(\xi, s) = -\int_0^1 G_0(r,\xi) G_0(r,s) dr,$$

$$f(s) = f_0(s) = -p_0 \cdot \int_0^1 G_0(r,s) dr.$$

Нехай $\forall i > 0$ $u_0^{(i)}(s)$ рекурентно визначається з формули

$$u_0^{(i+1)}(s)=\int_0^1 A_0(\xi,s)u_0^{(i)}(\xi)d\xi+f_0(s),u_0^{(0)}\equiv 0. \quad (23)$$

Для $k\ge 1$ $z_k^{(i)}(s)=\begin{pmatrix}u_{2k-1}^{(i)}(s)\\ u_{2k}^{(i)}(s)\end{pmatrix}$ рекурентно визначається з формули

$$z_k^{(i+1)}(s)=-\frac{1}{(4k)^2}\int_0^1 A_k(\xi,s)z_k^{(i)}(\xi)d\xi+f_k(s), \quad z_k^{(0)}\equiv\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}. \quad (24)$$

При цьому

$$\max_{s\in[0,1]}\left\|\tilde{u}_0(s)-u_0^{(i)}(s)\right\|\le\frac{(e^{-2})^i}{1-e^{-2}}\cdot|p_0|e^{-1}, \quad (25)$$

$$\max_{s\in[0,1]}\left\|\tilde{z}_k(s)-z_k^{(i)}(s)\right\|\le\frac{\left(\frac{1}{4k^2}\right)^i}{4k^2-1}\cdot\left(|p_{2k-1}|+|p_{2k}|\right). \quad (26)$$

У якості наближеного керування розглянемо функцію

$$u_N^{(i)}(r,\theta)=\sum_{k=0}^{2N-1}u_k^{(i)}(r)\varphi_k(\theta)= \quad (27)$$

$$=u_0^{(i)}(r)\cdot\theta+\sum_{k=0}^{2N-1}\left(u_{2k-1}^{(i)}(r)\theta\cos 2k\theta+u_{2k}^{(i)}(r)\sin 2k\theta\right),$$

де $\{u_k^{(i)}(r)\}_{i=0}^{\infty}$ визначається з (23), (24).

Відповідний розв'язок задачі (1) матиме вигляд

$$\bar{y}(r,\theta)=\bar{y}_0(r)\theta+\sum_{k=1}^{\infty}(\bar{y}_{2k-1}(r)\theta\cos 2k\theta+ \quad (28)$$

$$+\bar{y}_{2k}(r)\sin 2k\theta),$$

де $\{\bar{y}_k\}_{k=0}^{\infty}$ визначаються формулами

$$\bar{y}_0(r)=p_0+\int_0^1 G_0(r,s)u_0^{(i)}(s)ds, \quad (29)$$

$$\bar{y}_{2k-1}(r)=\begin{cases}p_{2k-1}r^{2k}+\dfrac{1}{4k}\displaystyle\int_0^1 sG_k(r,s)u_{2k-1}^{(i)}(s)ds,\ 1\le k\le N,\\ p_{2k-1}r^{2k},\ k>N,\end{cases} \quad (30)$$

$$\bar{y}_{2k}(r)=\begin{cases}p_{2k}r^{2k}+p_{2k-1}r^{2k}\ln r+\dfrac{1}{4k}\displaystyle\int_0^1 sG_k(r,s)u_{2k}^{(i)}(s)ds+\dfrac{1}{4k}\int_0^1 s\overline{G}_k(r,s)u_{2k-1}^{(i)}(s)ds,\ 1\le k\le N-1,\\ p_{2k}r^{2k}+p_{2k-1}r^{2k}\ln r+\dfrac{1}{4k}\displaystyle\int_0^1 s\overline{G}_k(r,s)u_{2k-1}^{(i)}(s)ds,\ k=N,\\ p_{2k-1}r^{2k},\ k>N.\end{cases} \quad (31)$$

Підставляючи (27), (28) у критерій (2), маємо, що

$$\left|J(\tilde{u})-J(u_N^{(i)})\right|\le 2|p_0|^2\left(\frac{1}{7}\right)^i+$$

$$+\left(\frac{1}{4}\right)^i 5\cdot\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^3}\left(|p_{2k-1}|^2+|p_{2k}|^2\right)+ \quad (32)$$

$$+5\cdot\sum_{k=N}^{\infty}\frac{1}{k^3}\left(|p_{2k-1}|^2+|p_{2k}|^2\right)$$

Таким чином, доведена наступна теорема.

Теорема. Формула (27) реалізує наближене оптимальне керування в задачі (1)–(2) в тому сенсі, що $\forall\varepsilon>0\ \exists N_0\ \exists i_0\ \forall N\ge N_0\ \forall i\ge i_0$

$$\left|J(\tilde{u})-J(u_N^{(i)})\right|<\varepsilon.$$

Чисельні розрахунки. Для ілюстрації описаного методу проведено обчислення в пакеті Mathematica. У таблиці 1 наведено результати обчислювального експерименту для знаходження значень критерію (2) для перших семи кроків ітерації за припущення, що $u_0\equiv 0, p_0\equiv 1$.

Таблиця 1

Крок ітерації	Значення функціоналу на к-тому кроці ітерації
k=1	J_1=0.968006
k=2	J_2=0.968643
k=3	J_3=0.968208
k=4	J_4=0.968252
k=5	J_5=0.968247
k=6	J_6=0.968248
k=7	J_7=0.968248

Отже, за результатами обчислень можна стверджувати, що з кожним кроком ітерації значення функціоналу на відповідному наближеному оптимальному керуванні збігається до деякого точного значення. До того ж проведені обчислення демонструють, що швидкість такої збіжності є навіть більшою, ніж встановлено в умові (22).

Висновки. У роботі для задачі мінімізації квадратичного критерію якості на розв'язках еліптичного рівняння з розподіленим керуванням у правій частині, які задовольняють нелокальні крайові умови на границі області, доведено класичну розв'язність, тобто знаходиться оптимальний серед допустимих процесів. Також побудовано наближене оптимальне керування і обґрунтовано, що зазначене керування реалізує мінімум критерію якості та є близьким до оптимального, що ілюструють проведені чисельні розрахунки.

Список використаних джерел

1. *Егоров А. И.* Оптимальное управление тепловыми и диффузионными процессами / А. И. Егоров – Москва: Наука, 1978. – 463 с.
2. *Капустян В.Е.* Геометрические методы модального управления / В. Е. Белозёров, В.Е. Капустян. – Киев: Наукова думка, 1999. – 259 с.
3. *Моисеев Е.И.* О разрешимости нелокальной краевой задачи с равенством потоков на части границы и сопряженной к ней системе / Е. И. Моисеев, В. Э. Амбарцумян // Дифференциальные уравнения. – 2010. – Т. 46, № 5. – С. 718-725.
4. *Капустян О.А.* Задача оптимального керування для еліптичного рівняння з нелокальними крайовими умовами в круговому секторі / Капустян В.О., Капустян О.А., Мазур О.К. // Журнал обчислювальної та прикладної математики. – 2012. – № 2 (108). – С. 3-9.

References

1. EGOROV, A. (1978) *Optimalnoe upravlenie teplovyimi i diffuzionnyimi protsessami.* Moskva: Nauka.
2. KAPUSTYAN, V. and BELOZEROV, V. (1999) *Geometricheskiye metodyi modalnogo upravleniya.* Kiev: Naukova dumka.
3. MOISEEV, Ye. and AMBARTSUMIAN, V. (2010) O razreshimosti kraevoi zadachi s ravenstvom potokov na chasti granitsyi I sopriazhennoi k nei sisteme. *Differentsialnye uravneniya.* 46 (5). p. 718-725.
4. KAPUSTYAN, V., KAPUSTIAN, O. and MAZUR, O. (2012) Zadacha optymalnogo keruvannia dlia eliptychnogo rivniannia z nelokalnymy krayovymy umovamy v krugovomu sektori. *Zhurnal obchysluvalnoyi ta prykladnoyi matematyky.* 2 (108). p. 3-9.

Надійшла до редколегії 16.05.14

УДК 004.93

Клюшин Д.А.[1], д.ф.-м.н., проф.,

Голубєва К.М.[2], к.т.н., асистент.

Методи розпізнавання контурів зображень ядер клітин

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03187, м. Київ, пр-т Глушкова, 4д,
e-mail: dokmed5@gmail.com
[2] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03187, м. Київ, пр-т Глушкова, 4д,
e-mail: katrin_g@bigmir.net

D.A. Klyushin[1], doctor of physical and mathematical sciences, professor
K.M. Golubeva[2], candidate of technical sciences, assistant.

Methods of contour extraction in images of cell nuclei

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03187, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: dokmed5@gmail.com

[2] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03187, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: katrin_g@bigmir.net

Була розглянута задача виділення контуру ядер букального епітелію слизової оболонки порожнини рота. Показано, що класичні градієнтні методи на основі фільтрів є неефективними. Для сегментації зображень використовувалися фільтри Робертса, Лапласа та Собеля. При використанні фільтру Робертса отримали забагато ліній контурів. Оператор Лапласа посилив шум на зображенні. При застосуванні оператору Собеля отримали досить товстий контур ядра, але він виявився не дуже щільним, подекуди взагалі відсутнім. Натомість було продемонстровано якісне сегментування за допомогою методу, що ґрунтується на правилі 3-сігма, та адаптивного порогового методу. Перевагою методу, що ґрунтується на правилі 3σ, є простота та швидкість обчислень, але його застосування обмежується обов'язковою наявністю еталонного зображення фону ядер, які обробляються. Адаптивний пороговий метод для роботи еталонних зображень не потребує, але має більш складну реалізацію.

Ключові слова: контур, аналіз зображень, ядро клітини, сегментація.

We have considered the problem of contour extraction in images of cell nuclei of buccal epithelium of oral mucosa. We have demonstrated that the classical gradient methods based on filters are ineffective. The filters Roberts, Sobel and Laplace were used for image segmentation. There were too many contour lines when the Roberts filter was used. The Laplace operator increased noise on images. Using the Sobel operator we got thick outline of the nucleus, but it was not very dense, and it was particularly absent. Instead we have shown the high-quality segmentation of images using method based on 3-sigma rule and method with adaptive thresholding. The advantages of the method which is based on 3-sigma rule, are simplicity and high speed of computation, but the method used pattern image of background. Adaptive threshold method doesn't require any pattern images, but it has more complex implementation. Segmentation methods of images of cell nuclei of buccal epithelium the method of contour algorithms combined with removal of artifacts and smoothing.

Key Words: contour, image analysis, cell nuclei, segmentation.

Статтю представив д.т.н., пров.н.співр. Кудін В.І.

Вступ

Розпізнавання контурів зображень є складовою багатьох прикладних задач. При аналізі біологічного матеріалу для отримання вірогідного результату потрібно проаналізувати кілька десятків клітин, що визначає необхідність наявності автоматизованого підходу аналізу зображень. Розпізнавання контурів клітин ускладнюється тим, що їх колір не завжди значно відрізняється від кольору фону, а отже зображення клітини має не чіткі границі, і розповсюджені методи виділення контурів

© Д.А. Клюшин, К.М. Голубєва, 2014

можуть бути не дієвими. Більше того, зображення крім корисної інформації можуть містити артефакти. Отже, не дивлячись на те, що задача розпізнавання контурів носить допоміжний характер, вона не втрачає своєї складності та важливості.

Для сегментації цитологічних препаратів найчастіше використовують порогову бінаризацію, яка реалізується за допомогою простих у обчисленні методів [1]. Вони є ефективними у використанні, але лише за умови, що об'єкти (найчастіше це клітини) мають чіткі границі і значно відрізняються від фону своїм кольором. В будь-якому разі процес виділення ядер бажано контролювати і корегувати за необхідністю.

Також для знаходження контурів використовуються градієнтні методи, в основі яких лежить використання різних фільтрів. Результатом застосування цих методів є зображення із збільшеними інтенсивностями граничних точок, а не сам набір граничних пікселей, таким чином методи можуть бути не ефективними у випадку, коли об'єкти мають не чіткі границі та не значно відрізняються від фону.

Ефективним алгоритмом сегментації є метод вододілу, але у разі неоднорідності фону та структури ядра доцільно комбінувати методи математичної морфології та методи, які використовують інформацію про величину градієнта яскравості та форму клітин [2]. Комбінування методів дає хороші результати, однак в складних випадках доводиться корегувати результати сегментації власноруч.

Для виділення ядер клітин у полуавтоматичному режимі також використовується підхід на основі нечіткої логіки. Для класифікації були сформульовані нечіткі правила з використанням набору ознак, в основі яких є форма та колір зображень ядер.

Метод класифікації за допомогою нейронної мережі використовує для навчання алгоритм кластеризації [3]. Метод є ефективним у використанні, але все одне потребує наявності інструменту корегування результатів.

В низці робіт для сегментації цитологічних препаратів використовувалися методи, які ґрунтуються на параметричних та геометричних моделях активного контуру, в основі яких лежать моделі еволюції кривих [4].

Матеріали та методи

Матеріалом для дослідження були препарати букального епітелію слизової оболонки порожнини рота, які було взято згідно методики, описаної В.Д. Дишловим. Для одержання зображень інтерфазних ядер букального епітелію було використано цифровий аналізатор при збільшенні 10×100 (імерсійна система). Аналізатор складається із: мікроскопа Olympus BX 41 System, обладнаного цифровою фотокамерою Camedia C-5050 Zoom та програмним забезпеченням Olympus DP 80 FT 3.2 на базі комп'ютера Pentium 4 4.26 ГГц з операційною системою Windows XP.

На вихідних зображеннях знаходиться кілька ядер (від одного до десяти). Попередня обробка складається з вибору потрібних ядер та виділення їх з фону. Вибирає ядра фахівець: ядра повинні бути з одного шиповатого шару, вони не повинні бути зруйнованими та накладатись одне на одне, також, самі ядра мають бути без артефактів.

Розпізнавання контурів за допомогою фільтрів

Задача виділення ядра в загальному випадку зводиться до задачі виділення границь (контурів) [5], яка найчастіше розв'язується шляхом застосування до зображень різних фільтрів.

Фільтр Робертса. Найпростішим методом виділення контурів та перепадів яскравості є застосування нелінійного фільтру Робертса. Відповідно до цього методу обчислюється сума квадратів різниць між діагонально суміжними пікселями. Це може бути виконано згорткою зображення з двома ядрами:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \text{ та } \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Нехай $\tilde{x}_{i,j}$ – піксель i-го рядочка j-го стовпчика зображення, яке отримане після застосування до деякого зображення ядра перехресного оператору Робертса, тоді обчислення проводиться за однією з двох формул:

$$\tilde{x}_{i,j} = \sqrt{\left(x_{i,j} - x_{i+1,j+1}\right)^2 + \left(x_{i,j+1} - x_{i+1,j}\right)^2},$$
$$\tilde{x}_{i,j} = \left|x_{i,j} - x_{i+1,j+1}\right| + \left|x_{i,j+1} - x_{i+1,j}\right|,$$

де $x_{i,j}$ – піксель i-го рядка j-го стовпчика початкового зображення.

Перетворення кожного пікселя зображення перехресним оператором Робертса може показати похідну зображення вздовж ненульової діагоналі, комбінація цих перетворень зображень може також розглядатись як градієнт від двох верхніх пікселей до двох нижніх.

Позитивна риса застосування оператору Робертса – це швидкість обчислень. Він має також негативні риси у використанні: оператор дуже чутливий до наявності шумів на зображенні, отримані лінії контурів є доволі тоненькими.

При використанні фільтру Робертса до зображень ядер букального епітелію результат отримали незадовільний: ліній контурів забагато, оскільки як правило зображення самого ядра є неоднорідним, самі лінії майже не розрізняються серед загального фону.

Фільтр Лапласа. Для виділення контурів також може використовуватись дискретний оператор Лапласа, який також називають лапласіаном. Лапласіан двовимірної функції $f(x,y)$ є похідною другого порядку, яка визначається виразом

$$\nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}.$$

При використанні у виділенні контурів зображень оператор застосовується до околів 3x3, на яких обчислюється сума перепадів по відношенню до центрального пікселя. Дискретний лапласіан можна задати у вигляді згортки з ядром, при чому ядра визначені для одновимірних, двовимірних та трьохвимірних сигналів. При обробці зображень ядер букального епітелію використовувався двовимірний фільтр. Ядро в такому випадку має вигляд

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Формула для безпосереднього обчислення пікселей $\tilde{x}_{i,j}$ деякого зображення має вигляд:

$$\tilde{x}_{i,j} = x_{i,j-1} + x_{i-1,j} + x_{i+1,j} + x_{i,j+1} - 4x_{i,j}.$$

Також можна застосовувати дискретне наближення з використанням діагональних сусідніх елементів. В цьому випадку ядро має вигляд

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -8 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Формула обчислення пікселей $\tilde{x}_{i,j}$ для такого ядра:

$$\tilde{x}_{i,j} = x_{i-1,j-1} + x_{i,j-1} + x_{i+1,j-1} + x_{i-1,j} + x_{i+1,j} + x_{i-1,j+1} + x_{i,j+1} + x_{i+1,j+1} - 8x_{i,j}.$$

Використання дискретного оператора Лапласа є дуже потужним методом, але в нього є ряд недоліків. Необхідно зауважити, що Лапласіан є скалярною величиною, а не векторною, тобто використовуючи його неможна отримати напрямок границі. Крім того, цей оператор посилює шум на зображенні. При чому, чим вище порядок похідної, тим більше ця особливість проявляється. Внаслідок того, що ядра самі по собі мають чимало перепадів, а масштаб цих перепадів виявився меншим масштабу самого ядра, яке необхідно було виділити, то застосування оператору Лапласа виявилося незадовільним.

Фільтр Собеля. В області обробки зображень дуже часто використовується фільтр Собеля. Він представляє собою дискретний диференційний оператор, який обчислює наближене значення градієнта яскравості зображення. Результатом застосування фільтру Собеля в кожній точці зображення є або вектор градієнта яскравості, або його норма. Оператор Собеля ґрунтується на згортці зображення невеликими окремими цілочисельними фільтрами у вертикальному та горизонтальному напрямках.

Завдяки знаходження градієнту в кожній точці зображення, знаходиться напрямок найбільшого зростання яскравості та величина її зміни в цьому напрямку. Оскільки результат виявляє величину зміни яскравості зображення, то можливо знаходити контури зображення.

Строго кажучи, градієнт функції двох змінних для деякої точки зображення, яка представлена значенням яскравості, – це двовимірний вектор, компонентами якого є похідні яскравості зображення по горизонталі та вертикалі. В кожній точці градієнтний вектор орієнтований у напрямку найбільшого зростання яскравості, а його довжина відповідає величині зміни яскравості. Таким чином, результатом застосування фільтру Собеля в точці області, в якій яскравість є постійною, буде нульовий вектор, а в точці, яка лежить на межі областей з різними яскравостями – вектор, який перетинає границю у напрямку зростання яскравості.

Для згортки початкового зображення використовуються ядра 3x3. Наближення похідної по x виконується за допомогою ядра

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Для наближення похідної по y використовується ядро

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & -2 & -1 \end{bmatrix}.$$

З технічної сторони застосування вказаної згортки є простою задачею. Для кожного пікселя початкового зображення $x_{i,j}$, де i – рядок зображення, а j – стовпчик, обчислюються похідні G_x та G_y:

$$G_x = x_{i-1,j-1} + 2x_{i-1,j} + x_{i-1,j+1} - \\ - x_{i+1,j-1} - 2x_{i+1,j} - x_{i+1,j+1},$$

$$G_y = x_{i-1,j-1} + 2x_{i,j-1} + x_{i+1,j-1} - \\ - x_{i-1,j+1} - 2x_{i,j+1} - x_{i+1,j+1}.$$

Наближене значення величини градієнта обчислюється за отриманими наближеними значеннями похідних:

$$G = \sqrt{G_x^2 + G_y^2}.$$

Серед переваг фільтру Собеля є те, що стає можливим обчислити напрямок градієнта, але в той же час є і недоліки. Запропонована апроксимація градієнта є досить грубою, це проявляється негативно при аналізі високочастотних коливань на зображенні.

Застосування оператору Собеля виявилося найкращим, у порівнянні з іншими розглянутими операторами. Контур є досить товстим, але при більш детальному вивченні виявився не дуже щільним, подекуди він взагалі відсутній. В той же час контурні лінії всередині ядра перетинаються з контуром самого ядра, таким чином дуже важко чітко встановити необхідні границі.

Знаходження контуру за допомогою правила 3-сігма

Оскільки застосування фільтрів до зображень з ядрами не дає якісного знаходження контурів, був запропонований новий метод, який ґрунтується на правилі 3σ.

Класичне емпіричне правило 3σ стверджує, що на практиці, довірчий інтервал $\left(m(x) - 3\sigma(x),\ m(x) + 3\sigma(x)\right)$ містить не менше 95% значень генеральної сукупності, де $m(x)$, $\sigma^2(x)$ – математичне сподівання та дисперсія випадкової величини x відповідно. Використаємо це правило для виділення ядра.

Нехай є деяке зображення, кожен піксель якого представлений значенням яскравості. Зображення складається з N точок, частина яких належить генеральній сукупності G_1 – множині точок ядра, а інша частина точок належить G_2 – генеральній сукупності точок фону. Завдяки тому, що для кожного зображення з ядрами зберігається відповідне йому еталонне зображення (частина типового фону без наявності зайвих артефактів), стає можливим обчислення середнього значення фону $\bar{x}_\phi$ та його стандартного відхилення σ_ϕ:

$$\bar{x}_\phi = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} x_i,\ \sigma_\phi = \sqrt{\frac{1}{M-1}\sum_{i=1}^{M}\left(x_i - \bar{x}_\phi\right)^2},$$

де M – кількість точок фону еталонного зображення;

x_i, $i = \overline{1, M}$, – значення яскравості точок фону.

Спираючись на особливості розподілів генеральних сукупностей G_1 та G_2, а також на класичне правило 3σ, можемо сформулювати метод для визначення точок ядра. Середнє значення в генеральній сукупності G_1 менше, ніж середнє значення в G_2, оскільки ядро є темнішим за фон. Отже, деяка точка зображення з яскравістю y_j, $j = \overline{1, N}$, буде належати генеральній сукупності G_1, тобто є точкою ядра, якщо $y_j < \bar{x}_\phi - 3\sigma_\phi$. При застосуванні правила 3σ до задачі виділення ядра отримали дуже гарний результат.

У випадку, коли фон, що знаходиться в околі ядра, однорідний без різких перепадів значень яскравостей, то контур знаходиться досить точно. Перевагою викладеного методу можна вважати простоту і швидкість обчислень, але застосування цього методу обмежується тим, що для його виконання обов'язковою є наявність еталонного зображення фону ядер, які обробляються. Якщо з якихось причин потрібних зображень немає, то доцільно використовувати для виділення ядер інший метод.

Адаптивна порогова обробка зображень

Клас методів порогової обробки зображень ґрунтується на попередньому виборі так званого порога яскравості, який потрібен для розбиття зображення на два кластери. Задача ускладнюється тим, що кожне зображення має свій власний поріг, оскільки середнє значення яскравості різних зображень дуже відрізняється.

Найбільш відомою та поширеною у використанні на сьогоднішній час є порогова обробка за методом Отсу [1]. Цей метод використовується для виконання порогової бінаризації півтонових зображень. Алгоритм передбачає наявність в зображенні двох класів пікселей (основних і фонових) і шукає оптимальний поріг, який розподіляє їх на два класи таким чином, що їх внутрішньокласова дисперсія була мінімальною.

Наведений принцип методу було використано для виділення ядер, розглядалися два кластери: пікселі ядра та пікселі фону. Викладемо метод більш детально. Нехай є деяке зображення, кожна точка якого представлена значенням інтенсивності сірого кольору. Отже, маємо N точок зображення та L градацій сірого кольору. Припустимо, що всі точки зображення можливо розбити на два класи C_1 и C_2, які розрізнятимуть точки з інтенсивностями $[1,...,k]$ та $[k+1,...,L]$ відповідно. Тоді оптимальним значенням порога T буде таке значення k, $1 \le k \le L$, при якому міжкласова дисперсія $\sigma^2_{C_1C_2}$ досягає максимального значення:

$$T = k \left| \sigma^2_{C_1C_2} \max \right. .$$

Міжкласова дисперсія $\sigma^2_{C_1C_2}$ обчислюється за формулою

$$\sigma^2_{C_1C_2} = \omega_1\omega_2(\mu_2 - \mu_1)^2,$$

де ω_1 – ймовірність потрапляння в клас C_1; ω_2 – ймовірність потрапляння в клас C_2; μ_1 – значення середньої яскравості в класі точок C_1; μ_2 – значення середньої яскравості в класі точок C_2.

Для обчислення міжкласової дисперсії спершу необхідно побудувати гістограму зображення – розподіл, який визначає кількість точок n_i, які мають інтенсивність I, від загальної кількості точок зображення N. Для обчислення ймовірностей ω_1 та ω_2 потрапляння в класи C_1 та C_2 відповідно, скористаємось формулами:

$$\omega_1 = \sum_{i=1}^{k} p_i \ , \ \omega_2 = 1 - \omega_1,$$

де p_i – розподіл ймовірностей, який обчислюється за формулою $p_i = n_i / N$.

Значення μ_1 та μ_2 середньої яскравості в класах точок C_1 та C_2 відповідно обчислюється за формулами

$$\mu_1 = \frac{1}{\omega_1}\sum_{i=1}^{k} ip_i \ , \ \mu_2 = \frac{1}{\omega_2}\sum_{i=k+1}^{L} ip_i \ .$$

Послідовно порівнюючи значення інтенсивностей кожного пікселя зображення із вибраним порогом T, визначається приналежність точки до відповідного класу. Всі точки, які належать до класу C_2, зафарбуємо чорним кольором.

Виділення ядра за допомогою адаптивної порогової обробки зображення виявило себе з найкращої сторони. Контур ядра виділяється досить чітко. Алгоритм методу є досить простим у виконанні, але при його застосуванні витрачається більше часу, ніж при застосуванні методу, який ґрунтується на правилі 3σ.

Видалення артефактів та згладжування виділених ядер

При наявності будь-яких артефактів на фоні зображення виділення ядра може відбутися не зовсім коректно. Коли йдеться мова про зображення ядер букального епітелію, то під артефактами маються на увазі, наприклад, забруднення – невеличкі плями чорного чи просто темного кольору, пофарбований фон – зустрічається у випадках, коли препарати були погано промиті під проточною водою; представляє собою області різної площі (від кількох пікселей до кількох десятків). Яскравість забарвлення таких областей схожа із яскравістю самого ядра, отже, в процесі виділення ядра ці області на фоні залишаються.

З іншого боку, при виділенні контуру ядра необхідно врахувати таку особливість, як неоднорідність розподілу хроматину в ядрі. На практиці це означає, що в самому ядрі серед темних ділянок можуть бути дуже світлі, які за значенням своєї яскравості можуть навіть співпадати із середнім значенням яскравості загального фону.

Отже, у випадку, коли в процесі виділення контуру деякі області на зображенні ядра були ініціалізовані як фон і відповідно пофарбовані чорним кольором, необхідно відновити початковий колір, але зробити це лише для вказаних областей. Цей процес і мається на увазі під згладжуванням виділених ядер.

Ідея алгоритмів в обох описаних випадках дуже схожа. Наприклад, для видалення артефактів послідовно розглядаються пікселі зображення спочатку по горизонталі, а потім по вертикалі і знаходяться області, площа яких менше деякого визначеного значення. Якщо серед фону знаходиться невелика область нечорного кольору, то це означає, що натрапили на артефакт, отже, зафарбовуємо його в чорний колір. Переглянувши таким чином всі рядочки, а потім стовпчики зображення, позбудемося всіх артефактів.

Так саме, як і алгоритм видалення артефактів, працює алгоритм пошуку чорних плям на ядрі. Якщо серед ядра знаходиться невелика ділянка чорного кольору, при чому заздалегідь відомо, що на ядрі артефактів бути не може (це є однією з вимог при виборі ядер), то проводимо відновлення початкового кольору на цій ділянці. Таким чином шукаються ділянки спочатку по рядочках зображення, а потім по стовпчиках.

Висновки

Класичні фільтраційні методи виділення контуру зображення, при застосуванні їх до виділення контуру ядер букального епітелію, показали поганий результат. Натомість метод, що ґрунтується на правилі 3σ, та адаптивний пороговий метод виявили якісне сегментування. Перевагою методу, що ґрунтується на правилі 3σ, є простота та швидкість обчислень, але його застосування обмежується обов'язковою наявністю еталонного зображення фону ядер, які обробляються. Адаптивний пороговий метод для роботи еталонних зображень не потребує, але має більш складну реалізацію.

Виходячи з особливості структури досліджуваного матеріалу, при виділенні ядер букального епітелію з фону, методи знаходження контурів поєднуються з алгоритмами видалення артефактів та згладжування.

Список використаних джерел

1. *Otsu N.* A threshold selection method from gray-level histograms / N. Otsu // Trans. Sys., Man., Cyber. – 1979. – **V. 9, № 1**. – P. 62-66.
2. *Wahlby C.* Segmentation of Cell Nuclei in Tissue by Combining Seeded Watersheds with Gradient Information / C. Wahlby, E Bengtsson // Image Analysis. – 2003. – **V. 2749**. – P. 408-414.
3. *Colantonio S.* Automatic Fuzzy-Neural Based Segmentation of Microscopic Cell Images / S. Colantonio, I.B. Gurevich, O. Salvetti // Int. J. of Signal and Imaging Systems Engineering. – 2008. – **V. 1, № 1**. – P. 18-24.
4. *Karlsson A.* Segmentation of Histological Section Using Snakes / A. Karlsson, K. Strahlen, A. Heyden // Image Analysis. – 2003. – **V. 2749**. – P. 595-602.
5. *Сойфер В.А.* Компьютерная обработка изображений. Часть 2. Методы и алгоритмы / В.А. Сойфер // Соросовский образовательный журнал. – 1996. – **№ 3**. – С. 110-121.

References

1. OTSU, N. (1979) A threshold selection method from gray-level histograms. *Trans. Sys., Man., Cyber.* 9 (1). p.62-66.
2. WAHLBY, C. & BENGTSSON, E (2003) Segmentation of Cell Nuclei in Tissue by Combining Seeded Watersheds with Gradient Information. *Image Analysis.* 2749. p.408-414.
3. COLANTONIO, S., GUREVICH, I.B., SALVETTI, O. (2008) Automatic Fuzzy-Neural Based Segmentation of Microscopic Cell Images. *Int. J. of Signal and Imaging Systems Engineering.* 1 (1). p.18-24.
4. KARLSSON, A., STRAHLEN, K. & HEYDEN, A. (2003) Segmentation of Histological Section Using Snakes. *Image Analysis.* 2749. p.595-602.
5. SOIFER, V.A. (1996) Computer Image Processing. Part № 2. Methods and Algorithms. *Soros Educational Journal.* 3. p.110-121.

Надійшла до редколегії 29.05.14

УДК 519.9

Ковальов Д.І.[1], аспірант

D.I. Kovaliov[1], post-graduate

Методи адаптивної оцінки у системах електронного навчання

Fuzzy assessment methods in e-learning system

[1] Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: daniil.kovaliov@gmail.com

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: daniil.kovaliov@gmail.com

Розглядаються проблеми оцінювання знань у системах електронного навчання (e-learning). Пропонуються алгоритми методів корегування та адаптації рівня складності питань семи типів: бінарні питання («так-ні»); одна вірна відповідь з багатьох варіантів; багато з багатьох; число як відповідь; інтервал як відповідь; множина як відповідь; слово чи слова як відповідь. Ці алгоритми допомагають при визначенні коректності оцінок у реальному часі під час проведення тестувань у вузах та школах. Також описано приклад програмного забезпечення розробленого з використанням зазначених алгоритмів, його створення командою студентів, тестове введення в процес навчання та використання.

Ключові слова: електронне навчання, нечітка оцінка, адаптивні моделі.

This article reviews algorithms of adjustment and adaptation methods of complexity level used for seven types of questions: binary questions ("yes-no"); one correct answer out of many options; many answers out of many options; number as an answer; range as an answer; array as an answer; one or few words as an answer. These algorithms help to determine the correctness of estimates in real time during knowledge evaluation in universities or schools. Also an example of software developed with mentioned algorithms, its creation by a team of students, testing implementation into educational process and usage are described. Example software tool and mentioned algorithm are allows students and teachers to save time, optimize learning process and define actual assimilation level of the material. This might be a part of a big educational service, providing real e-learning principles to classrooms.

Keywords: e-learning, fuzzy evaluation, the adaptive model

Статтю представив д.т.н. проф. Волошин О.Ф.

Вступ

З 2005 року під керівництвом проф. Волошина О.Ф. на факультеті кібернетики КНУ ім. Шевченка студентами 3-го курсу, спеціальність інформатика, під час виконання лабораторних робіт розробляються програмні системи підтримки нормативного курсу «Теорія прийняття рішень» у відповідності з навчальними посібниками [1,2]. Перші версії системи SMPR являли собою набір окремих модулів, у наступних версіях системи модулі були об'єднані в одну програму та мали спільний інструмент обміну даними, що дозволяв передавати розв'язки між модулями[3]. У 2010 році було розпочато створення тестуючої частини системи, що дозволила, крім надання методичної інформації та розв'язку задач, оцінювати знання студентів. В [4] представлено перші результати з розробки програмної компоненти системи для оцінювання знань, що використовувалась під час літньої сесії у червні 2013р. Результуюча оцінка знань залежала від складності завдання, яку визначав викладач наперед. В даній роботі для підвищення адекватності оцінювання знань пропонуються алгоритми, що базуються на методах «адаптивної оцінки», описаних у монографії [5].

Алгоритми адаптації та корегування складності завдань

Складність завдання $p \in (0,1]$ будемо вважати низькою при $p \in (0, 0.33]$, середньою при $p \in (0.33, 0.66]$ і високою при $p > 0.66$. Максима-

© Д.І. Ковальов, 2014

льна оцінка, яку може отримати студент за проходження блоку завдань – 1, тобто 100%. Далі, за бажанням викладача, ця оцінка може бути автоматично перерахована в одну з систем оцінювання знань (болонська, п'ятибальна).

Якщо викладач виставив деяку початкову складність всіх завдань блоку ($p_i^0, i = \overline{1,m}$), то системі необхідно врахувати деякі евристики під час вибору наступного питання:

- складність першого питання система вибирає відповідно до середнього рівня знань студента ($y_j \in [0,1]$);
- якщо студент дає правильну відповідь, то складність питання зменшується, і навпаки;
- динаміка значень рівня складності завдань залежить від кількості студентів що проходять завдання та від середнього рівня знань кожного;
- якщо студент з відносно високим рівнем підготовки дає вірну відповідь, складність питання зменшується на менше значення, ніж для студента з низьким рівнем знань;
- значення мінімальної складності має бути більше нуля
- значення максимальної складності не більше одиниці;
- при великій кількості студентів складність питання зійдеться до деякої постійної величини;

Після проведення тестування система перераховує вартість питань і записує нові значення у базу. Якщо в оцінці знань приймало участь n студентів і було m питань, то корекція складності буде розрахована за формулою:

$p_i^j = p_i^{j-1} + f_i(p_i^0, m, d^{j-1}, Z),\ \ j = \overline{1,n},\ \ , i = \overline{1,m}$, де p_i^j- складність i-го завдання при проходженні j-го студента; f_i - функція згідно до якої відбувається корегування оцінки; d^{j-1} сумарна оцінка $j-1$ студента; Z – деяка величина, що залежить від відхилення даної відповіді від правильної.

Типи питань та специфіка роботи з ними

1. Питання з бінарними відповідями («так» чи «ні»). При цьому $Z = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}$ відповідно до того, чи правильно дана відповідь.

2. Питання, де правильна відповідь вибирається з декількох, а правильність кожного варіанту відповіді оцінюється балом. При цьому в такого питання є вектор балів $v = (v_1, \dots v_k)$. Тоді $Z = (\max\limits_{l=1,k} v_i^{j-1} - a_i^{j-1})$, де $\max\limits_{l=1,k} v_i^{j-1}$– максимальний бал за відповідь, a_i^{j-1} – бал, отриманий студентом.

3. Питання, де декілька правильних відповідей вибираються із багатьох варіантів:

$p_i^j = p_i^{j-1} + f_i\left(p_i^0, m, d^{j-1}, \sum_l v_l^{j-1}, h^n, h^H\right)$ де $\sum_l v_l^{j-1}$– сума балів за обрані варіанти відповіді, h^n – кількість правильних відповідей, h^H – кількість неправильних відповідей.

4. Питання, де відповідь це число. У цьому випадку до бази даних необхідно додати інформацію щодо правильної відповіді та відрізку, на якому може знаходитись відповідь студента. При цьому формула набуде вигляду:

$$p_i^j = p_i^{j-1} + f_i\begin{pmatrix} p_i^0, m, d^{j-1}, \\ x(z \in [z_b, z_e]), \\ |z - z^*| \end{pmatrix}$$

У даному випадку z^*– значення правильної відповіді, $[z_b, z_e]$ – інтервал, на якому має знаходитись відповідь студента.

5. Питання, де відповіддю є інтервал.

$$p_i^j = p_i^{j-1} + f_i\begin{pmatrix} p_i^0, m, d^{j-1}, \\ x(min\{z^2, z_e\} \geq \max\{z^1, z_b\}), \\ |z - z^*|, (min\{z^2, z_e\} \geq \max\{z^1, z_b\}) \end{pmatrix}$$

Тут $[z^1, z^2]$ це відрізок, вказаний студентом в якості відповіді.

6. Питання, відповіддю на які є нечіткі величини, що визначаються функцією належності мають свій підхід, що зводить їх до питань четвертого типу (відповідь це число).

7. Питання, відповіддю на які є слово або словосполучення. Через те, що відповідь може бути сформульована студентом правильно, але не тими словами, що використовував викладач, виникає неузгодженість. Для обробки такого типу питань необхідно використовувати словники з синонімічними рядами та алгоритми пошуку спорідненості текстів.

Верифікація змін складності питань

Оскільки під час роботи зі студентами можливі випадки «саботування» системи для отримання кращих результатів, система має реєструвати всі можливі зміни перед їх застосуванням, та порівнювати з попередніми. У випадку викидів (значної різниці між результатами поперед-

них проходжень тестового блоку та поточного проходження) викладач має провести експертний аналіз результатів та підтвердити або відхилити внесення змін.

Оцінююча система

Під час розробки оцінюючої компоненти системи SMPR стало зрозумілим, що її можна використовувати незалежно від прикладної компоненти і рекомендувати як окремий проект, який би дозволив створювати та проводити тестування з будь-якого предмета. За основу було взято платформу ASP.NET C# [6], а саме MVC Framework.

Причиною такого вибору стала необхідність задовільнити потребу максимальної доступності програмного забезпечення та незалежність його від платформи. Зазначені вище технології дозволяють створити веб-сайт, що має простий та зрозумілий зовнішній вигляд та складні обчислення на стороні сервера.

Програмний продукт було створено під керівництвом автора командою з 8 студентів, що працювала за методологією командної розробки програмного забезпечення відомої як скрам [7].

Веб-сайт дозволяє створювати серії питань різного типу, що об'єднуються в тести. Оцінка за кожне питання визначаються зазначеними у статті алгоритмами після того, як група студентів, визначена викладачем, завершить проходження тестування. Викладач може власноруч виставляти початкову оцінку кожному питанню або дочекатись результатів першої сесії, на основі яких може почати працювати адаптивний алгоритм.

Висновок

У цій статті розглянуто можливість практичного застосування методів адаптаційної корекції складності завдань під час проведення оцінювання студентів з використанням тестувально-оцінюючих електронних систем (на прикладі системи SMPR та відповідного веб-сайту). Розробники системи застосовують наведені алгоритми під час створення системи та планують протестувати їх на найближчій екзаменаційній сесії.

Список використаних джерел

1. *Волошин О.Ф., Мащенко С.О.* Теорія прийняття рішень. – К.: Видавничий центр «Київський Университет», 2006. – 304 с.
2. *Волошин О.Ф., Мащенко С.О.* Моделі та методи прийняття рішень. – К.: Видавничий центр «Київський Університет», 2010. – 336 с.
3. *Волошин О.Ф., Ковальов Д.І.* Программная система поддержки курсов по теории принятия решений // Problems of Computer Intellectualization. – Kyiv-Sofia: ITHEA, 2012. – P.293-298.
4. *Снітюк В.Е.*, *Юрченко К.М.* Интеллектуальное управление оцениванием знаний, Маклаут, Черкассы 2013. – 224 с.
5. *O.F. Voloshyn, D.I. Kovaliov,* Educational system support to decision making theory. Computer Science And Information Technologies Conference, Yerevan 2013, pp 433-434
6. A. Freeman, M. MacDonald and M. Szpuszta, Pro ASP.NET 4.5 in C#. 5th edition, Apress, 2013
7. H.Kniberg, Scrum and XP from the Trenches, C4Media, publisher of InfoQ.com, 2007

References

1. VOLOSHYN, O.F., MASHCHENKO, S.O. (2006) *The theory of decision making.* Publishing center "Kiev University", Kiev.
2. VOLOSHYN, O.F., MASHCHENKO, S.O. (2010) *Models and methods of decision-making.* Publishing center "Kiev University", Kiev.
3. VOLOSHYN, O.F., KOVALIOV, D.I. (2012) *Software system to support courses on the theory of decision-making.* Problems of Computer Intellectualization, Kyiv-Sofia: ITHEA.
4. SNITIUK, V.E., YURCHENKO, K.M. (2013) Intelligent *control of knowledge evaluation.* Cherkasy: Maklaut.
5. VOLOSHYN, O.F., KOVALIOV, D.I. (2013) *Educational system support to decision making theory.* Computer Science and Information Technologies Conference, Yerevan.
6. FREEMAN, A., MACDONALD M. and SZPUSZTA, M. (2013) *Pro ASP.NET 4.5 in C#.* 5th edition, Apress.
7. KNIBERG, H. (2007) *Scrum and XP from the Trenches (Enterprise Software Development)*, C4Media, publisher of InfoQ.com

Надійшла до редакції 15.05.14

УДК 004.519

Компан С.В.[1], аспірант

Типізація сучасних баз даних (огляд)

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д

e-mail: robin_2005@mail.ru

S.V. Kompan[1], postgraduate

Typification of modern databases (review)

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d

e-mail: robin_2005@mail.ru

Згідно сучасного підходу основу кожної більш-менш складної інформаційної системи складає база даних. У статті представлено характеристики основних типів баз даних. Приділено увагу реляційним, об'єктним, об'єктно-реляційним та NoSQL базам даних. Наведено важливі історичні факти з розвитку типів баз даних. Представлено визначення терміну «база даних», яке використовується в спеціальній літературі. Приділено увагу огляду стану справ із нормалізації реляційних баз даних. Розглянуто формальні основи реляційних баз даних. Розглянуто формальні основи нормалізації реляційних баз даних. Проведено огляд мови SQL для реляційних баз даних і різноманітних мов запитів для об'єктних. Розглянуто складові «вартості» запиту як однієї з характеристик оптимізації виконання запитів. Приділено увагу перетворенню об'єктної моделі в реляційну за допомогою Object Relation Mapping. Наведено складові реляційної моделі та типізація NoSQL баз даних.

Ключові слова: типи баз даних, мова SQL, формальні моделі баз даних, реляційні бази даних, об'єктні бази даних, об'єктно-реляційні бази даних, NoSQL бази даних.

According to the foundation of the modern approach each more or less information systems include a database. This paper presents a description of specifications of the main database types. Relational, object, object-relational and NoSQL databases are under study. The formal bases of relational databases are examined. A historical survey of the development of database types is made. The definition of the notion "database" currently used in research literature is given. The formal frameworks of the relational database and relational database normalization are examined. The article presents the types of anomalies and the problem of normalization. An overview of the SQL language for the relational DB and request languages for the object databases is made. The components of request "processing optimization" are analyzed. Attention is given to the transformation of the objective model into the relational one by means of Object Relation Mapping. The components of the relational model and typification of NoSQL databases are examined. The types of queries in object databases are examined.

Key Words: types of databases, query language SQL, formal models of databases, relational databases, object databases, object-relational databases, NoSQL dtabases.

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Буй Д.Б.

Одним з найважливіших компонентів будь-якої складної програмно-апаратної системи є зв'язка база даних (БД) – система управління базами даних (СУБД). Парадигма БД сформувалася в середині 60-років XX сторіччя як результат багатьох спроб позбавитися від недоліків файлових систем організації інформації. Основними з яких є [1]:

1) ізольованість даних (програмні додатки, що працюють паралельно, не можуть одночасно змінювати записи в одному і тому ж файлі, а сумісна обробка файлів досить важка);

2) залежність програм від даних (наявність опису структури даних в прикладній програмі потребує при зміні структури файлу внесення відповідних змін в програму);

3) дублювання даних (різні програмні додатки, які використовують однакову інформацію про один і той же об'єкт, що зберігається в різних файлах, можуть потенційно призвести до порушення цілісності даних);

4) відсутність опису даних (в файлах даних, які обробляються прикладними програмами, дані зберігаються без відокремленого їхнього опису,

© С.В. Компан, 2014

що ускладнює документування інформаційної системи, а це потенційно призводить до появи помилок).

Постановка задачі. Завданням статті є аналіз сучасного стану справ в області БД.

БД можна умовно розділити на типи в залежності від моделі даних, на основі якої вони побудовані. Тому аналіз існуючих БД будемо робити, відштовхуючись саме від моделі даних.

Історичний огляд розвитку БД. Основний розвиток СУБД почався в 60-роки XX сторіччя, коли корпорація IBM разом з фірмою NAA (North American Aviation) розробили першу СУБД – ієрархічну систему IMS (Information Management System) (див., наприклад, [2]). В середині 60-років поява системи IDS (Integrated Data Store) надала розвитку СУБД новий імпульс. Розвиток цієї СУБД призвів до появи нового типу СУБД – мережевого. В 1970 р. Е.Ф. Кодд в статті [3], визначив реляційну модель даних, яка усувала недоліки попередніх моделей. В запропонованій моделі Кодда можна було виділити три аспекти: цілісний, структурний і маніпуляційний. В основі реляційної моделі лежать структури даних на "плоских" нормалізованих відношеннях, обмеження цілісності визначаються засобами логіки першого порядку, а маніпуляції над даними відбуваються засобами реляційної алгебри (реляційного числення на доменах чи кортежах). Саме завдяки розвиненому в математиці апарату теорії множин, логіки першого порядку та теорії відношень реляційна модель набула широкого розповсюдження. В цій моделі Кодд запропонував 8 операцій реляційної алгебри: традиційні операції над таблицями, які розуміються як множини рядків (об'єднання, перетин, різниця) та спеціальні операції над таблицями (проекція, декартове з'єднання, з'єднання (theta-, equi-), ділення, селекція), що використовують специфіку таблиць і рядків [3]. Набір операцій реляційної алгебри, запропонований Коддом, з часом був розширений відповідно до потреб мов запитів. Крім вказаних вище операцій до сигнатури реляційної алгебри зараз також відносять операції перейменування та активного доповнення [4, 5].

Наступні типи СУБД, які з'явилися після реляційних, можна віднести до так званих "постреляційних". Так, в [6] застосовується поняття "постреляційні" БД для розширених реляційних, багатомірних та об'єктно-орієнтованих СУБД.

Основи об'єктно-орієнтованого програмування (ООП), зокрема, об'єктна модель даних (ОМД), були закладені наприкінці 60-х років минулого сторіччя [7] і з цього моменту набувала вдосконалення. Поява ОМД пов'язана з поняттям абстрактних типів даних (АТД) [8, 9]. Саме ООП дало поштовх до створення в середині 80-років минулого сторіччя нового типу СУБД – об'єктних. У 1996 р. з виходом СУБД Informix Universal Server корпорації Informix почалася епоха об'єктно-реляційних БД. Наприкінці 90-х років з'явився новий напрямок в розвитку СУБД – так звані NoSQL (Not only SQL) СУБД, націлені на обробку великих об'ємів слабоструктурованої інформації.

Зауважимо, що існують багато визначень терміну БД, які взаємно доповнюють одне одного. Так в [10] БД – це по суті, не що інше, як комп'ютеризована система збереження записів. В [11] БД визначається, в широкому розумінні, як набір логічно зв'язаних даних (або опис цих даних), призначений для задоволення інформаційних потреб організації. На більш конкретному рівні під БД розуміється єдине велике сховище даних, яке однократно визначається, а потім використовується одночасно багатьма користувачами. В [12] БД – це самодокументоване зібрання інтегрованих записів. БД є самодокументованою (self-describing), якщо вона містить з даними користувача опис власної структури. Цей опис називається словником даних (data dictionary), каталогом даних (data directory) або метаданими (metadata). Слід зауважити, що згідно [12] БД є моделлю моделі. БД не моделює реальність або якусь її частину, а є моделлю моделі користувача (user model). В [13] під БД розуміється сукупність призначених для машинної обробки даних, яка слугує для задоволення потреб багатьох користувачів в рамках однієї або декількох організацій. В [14] під БД розуміється набір даних, що знаходиться під контролем СУБД.

Історично першим типом БД по суті була файлова система, яка, як було сказано вище, мала ряд принципових недоліків, усунення яких спричинило подальший бурхливий розвиток БД.

Реляційні БД. В основі функціонування реляційних БД лежить реляційна модель даних. Наведемо одне із багатьох означень реляційної БД.

Реляційна БД – це скінченний набір відношень. Відношення використовуються для представлення сутностей та зв'язків між сутностями [15]. В основі реляційної моделі лежать такі складові [11]:

- відношення, фізичним представленням якого є "плоска" таблиця, що складається із стовпців та рядків; рядки відповідають окремим записам, а стовпці – атрибутам;

- атрибут – іменований стовпець відношення; атрибути можуть розташовуватися в таблиці в довільному порядку;
- домен – множина допустимих значень одного або декількох атрибутів; кожен атрибут визначається на деякому домені; домен може бути системним або створеним користувачем на основі системних доменів;
- кортеж (синоніми – рядок, запис) – рядок відношення; кортежі в таблиці можуть бути розташовані в довільному порядку, при цьому відношення буде залишатися таким же самим, а отже мати той же зміст.

Зробимо декілька зауважень згідно [4, 17] щодо основного поняття реляційних БД – поняття реляції (синоніми – таблиці, відношення). Як всяке інтуїтивне поняття реляція потенційно припускає багато уточнень. Спочатку як одне з таких уточнень Коддом було вибране класичне логіко-математичне поняття скінченномісного відношення як підмножини декартова добутку множин, взятих у деякому порядку. На початковому етапі таке уточнення обумовило успішність та популярність реляційного підходу в БД. Дійсно, змістовні поняття уточнювались і досліджувались за допомогою добре розвиненого формального апарату (теорія відношень, фрагменти мов логіки предикатів першого порядку та ін.) [3, 16].

Разом з тим, традиційне уточнення реляції має ряд недоліків. Наприклад, інформаційний зміст реляції, не залежить від порядку слідування компонент, а для відношення цей порядок суттєвий.

Використання стандартних імен 1,2,.. для доступу до компонент елементів реляції (кортежам у даному випадку) обтяжливе, що, зокрема, призводить до появи в метамові, а не в мові-об'єкті довільних ("мнемонічних") імен як позначень стандартних.

Результатом традиційного декартова добутку відношень є бінарне відношення, яке складають пари кортежів відношень-аргументів, а результатом декартова добутку (краще казати, з'єднання) відношень в реляційній моделі – відношення арності n+m, де n,m – арності відношень-аргументів, яке складають кортежі, що отримуються конкатенацією вихідних кортежів. Ця, на перший погляд, невелика різниця в означеннях призводить до суттєвих розбіжностей властивостей цих двох операцій: так декартове з'єднання асоціативне (що випливає з асоціативності конкатенації), а вихідний класичний декартів добуток – ні.

Аналогічно, стандартна операція проектування відношення за компонентою дає множину, а операція проектування відношення в реляційній моделі – відношення меншої арності, ніж відношення-аргумент [4].

На сьогоднішній час існує багато формальних моделей реляційних БД. Особливу увагу слід звернути на роботи [18, 19], які виконані під керівництвом професора Д.Б. Буя. В основі цих робіт лежить композиційний підхід до програмування, який був запропонований академіком НАН України В.Н. Редьком [20].

Наведемо основні результати цих робіт. В [18] задаються теоретико-множинні операції на таблицях, які є аналогами звичайних теоретико-множинних операцій об'єднання, перетину та різниці.

Згідно [4, 18] таблиця визначається наступним чином. Зафіксуємо наступні дві множини: *A*, елементи якої назвемо атрибутами, і *D* – універсальний домен. Довільну скінченну множину атрибутів $R \subseteq A$ назвемо схемою.

Рядком схеми R називається іменна множина на парі *R*, *D* (тобто множина пар вигляду <атрибут, значення>), проекція якої за першою компонентою рівна *R*.

Таблицею схеми R називається пара $(\hat{t}, R)$, де $\hat{t}$ – скінченна множина рядків схеми *R*, яка називається станом таблиці, друга компонента таблиці схеми R називається, природньо, схемою. Відмітимо, що для непорожніх станів схема таблиці може бути відновлена по множині рядків. Але для порожньої множини рядків це неможливе. Множину всіх рядків (таблиць) схеми R позначимо *S(R)* (відповідно *T(R)*), а множину всіх рядків (таблиць) – *S* (відповідно *T*). Таким чином, $S \stackrel{\text{def}}{=} \bigcup_{R \subseteq A} S(R)$, $T \stackrel{\text{def}}{=} \bigcup_{R \subseteq A} T(R)$. Схема може бути порожньою; при цьому існує єдиний рядок порожньої схеми, який позначається ε. Рядки будемо позначати $s, s_1, s_2 \ldots$, таблиці – t, t_1, t_2.

Далі буде розглянута таблична алгебра $\langle T, \Omega \rangle$, де $T -$ носій, $\Omega -$ сигнатура. Під носієм табличної алгебри будемо розуміти множину всіх таблиць, під сигнатурою Ω – множину операцій на таблицях, що складається з обмежень стандартних теоретико-множинних операцій об'єднання, перетину та різниці на множину односхемних таблиць, а також певних спеціальних операцій.

Розглянемо формальне означення деяких операцій над таблицями.

Об'єднання двох таблиць (схеми R):

$\bigcup_R$: $T(R) \times T(R) \to T(R)$;

$(\hat{t}_1, R) \bigcup_R (\hat{t}_2, R) = (\hat{t}_1 \bigcup \hat{t}_2, R)$.

Перетин двох таблиць (схеми R):

$\bigcap_R$: $T(R) \times T(R) \to T(R)$;
$(\hat{t}_1, R) \bigcap_R (\hat{t}_2, R) = (\hat{t}_1 \bigcap \hat{t}_2, R)$.
Різниця двох таблиць (схеми R):
$\setminus_R$: $T(R) \times T(R) \to T(R)$;
$(\hat{t}_1, R) \setminus_R (\hat{t}_2, R) = (\hat{t}_1 \setminus \hat{t}_2, R)$.

Також визначаються операції внутрішнього з'єднання, а саме декартове з'єднання (cross join, Cartesian join), внутрішнє природнє з'єднання (inner natural join), внутрішнє з'єднання за атрибутами $A_1 \dots A_n$ (inner join on $A_1 \dots A_n$) та внутрішнє з'єднання за предикатом p (inner join on p). Наприклад, під декартовим з'єднанням розуміється часткова операція вигляду
$C_j: T \times T \nrightarrow T$,
$domC_j \stackrel{\text{def}}{=} \{(\hat{t}_1, R_1), (\hat{t}_2, R_2) | R_1 \bigcap R_2 = \emptyset\}$.

Стан результуючої таблиці на таблицях-аргументах $(\hat{t}_1, R_1), (\hat{t}_2, R_2)$ визначається формулою
$\{s | \exists s_1 \exists s_2 (s_1 \in \hat{t}_1 \wedge s_2 \in \hat{t}_2 \wedge s = s_1 \bigcup s_2)\}$.
Схема результуючої таблиці дорівнює $R_1 \bigcup R_2$. Серед операцій зовнішнього з'єднання в роботі задаються зовнішнє ліве з'єднання (outer left join), зовнішнє праве з'єднання (outer right join), зовнішнє повне з'єднання (outer full join) та зовнішнє з'єднання об'єднанням (outer union join).

В [19] вперше введено до розгляду табличну алгебру нескінченних таблиць, яка є узагальненням табличної алгебри. Узагальнено класичні результати Кодда-Лакруа-Піротта щодо еквівалентності реляційних алгебр та числень на кортежах (доменах). При цьому числення поповнені предикатними та функціональними сигнатурами, у той час у формулюваннях згаданих класичних результатів розглядають лише бінарні предикати, а функціональна сигнатура взагалі порожня. Побудовано мультимножинну табличну алгебру, сигнатуру якої поповнено новими операціями: операціями внутрішніх і зовнішніх з'єднань, операцією напівз'єднання, агрегатними операціями.

Мова SQL для реляційних БД. Реляційна модель тісно пов'язана з мовою SQL (Structured Query Language – мова структурованих запитів). Фактично коли говориться про мову програмування для реляційних БД, то мається на увазі саме SQL [18]. Дамо одне із означень мови SQL. SQL – формальна, непроцедурна мова програмування, що застосовується для створення, модифікації та керування даними в реляційній БД, яка керується відповідною СУБД.

Мову SQL можна поділити на дві частини: мову DDL (Data Definition Language) та мову DML (Data Manipulation Language). Засобами мови DDL можна створювати (оператор Create), модифіковувати (оператор Alter або Modify), знищувати (оператор Delete) елементи БД, а також можна керувати повноваженнями користувачів БД (оператори Grant, Revoke). Засобами мови DML можна здійснювати додавання (оператор Insert), знищення (оператор Delete), редагування (оператор Update) даних БД, а також їх вибірку (оператор запиту Select).

Для здійснення фільтрування рядків таблиці в мові SQL після службового слова Where використовуються предикати на рядках. Предикати можуть повертати третє логічне значення unknown разом з стандартними значеннями істини та хиби (true та false, відповідно). Це означає, що в SQL використовується трьохзначна логіка замість класичної двозначної (булевої), а саме це так звана сильна тризначна логіка Кліні.

Атомарні предикати з'єднуються в складні вирази булевими операціями кон'юнкції, диз'юнкції та заперечення, розширеними на трьохзначну логіку.

Оптимізація обробки запитів. Одною з основних задач, які стоять перед СУБД, є "оптимізація обробки" запитів. Під "оптимізацією обробки" запитів СУБД розуміють стратегії, які підвищують ефективність процедур обробки запитів. Такі стратегії представляють собою евристичні методи, доцільність використання яких обґрунтовується статистичними методами. Поняття "запит", по своїй суті, є виразом деякої мови і розглядається в наступних трьох контекстах [1].

1. Як стандартна вимога доступу користувача до даних БД (в цьому випадку "оптимізація" здійснюється за рахунок програмування відповідних процедур пошуку даних і перетворення входу користувача в результат необхідного формату).
2. Як транзакція, що здійснює зміну даних БД на підставі їх поточного значення.
3. Як вираз, який СУБД використовує для авторизації користувача, забезпечення цілісності даних і синхронізації багатокористувацького доступу до БД.

Однією з характеристик оптимізації запитів – є "вартість" запиту. Вартість запиту має декілька складових [1].

1. Комунікаційна вартість, тобто вартість передачі даних з їх місцеположення у вторинну пам'ять (пам'ять, з якої завантажуються дані для власне обчислення), а також вартість переміщення результату обчислення в його місце розташування.

2. Вартість доступу до вторинної пам'яті, тобто вартість завантаження порцій даних з вторинної пам'яті в основну пам'ять, яка використовується при обчисленні.
3. Вартість запам'ятовування, тобто вартість часу використання вторинної пам'яті і пам'яті буферів.
4. Вартість обчислення, тобто вартість часу, який використовується безпосередньо для обчислення.

Аномалії БД та їх усунення. БД може зберігати досить великий об'єм інформації, яка розподілена між таблицями цієї БД. Через це виникає ситуація, коли одні і ті ж дані можуть знаходитися (дублюватися) в декількох таблицях. Тоді можна говорити про надлишковість такої інформації в БД, наявність якої в БД вказує на можливі проблеми підтримки цілісності. При роботі з таблицями БД, які мають надлишкові дані, виникають проблеми, що називаються "аномаліями". Можна умовно розділити аномалії на три види:

- аномалія включення – проблема, пов'язана з додаванням інформації в БД;
- аномалія модифікування – проблема, пов'язана зі змінами інформації в БД;
- аномалії знищення – проблема, пов'язана з видаленням інформації з БД.

Питання усунення аномалій БД постає на етапі проектування БД. Саме під час проектування БД за рахунок нормалізації повинні вирішуватися задачі мінімізації дублювання даних і спрощення методів їх оновлення та обробки. Нормалізацією називається формальна процедура, в ході якої атрибути даних групуються в таблиці, а таблиці групуються в БД. Задачами нормалізації є [21]:

- виключення в таблицях інформації, що повторюється;
- створення структури, в якій передбачена можливість її майбутніх змін;
- створення структури, в якій вплив структурних змін на додатки, що використовують дані цієї БД, зведено до мінімуму.

Коротко розглянемо формальні основи нормалізації реляційних БД. Вперше термін "нормалізація" був застосований у 1970 р. Е.Ф. Коддом для назви процедури усунення непростих доменів [3]. Історично поняття першої нормальної форми (1НФ) трансформувалося та уточнювалося. Так, спочатку це поняття уточнювалося наступним чином: "Відношення знаходиться в 1НФ, якщо кожне значення у відношенні є атомарним елементом даних" [10]. Потім цьому поняттю надавався більш уточнений зміст: "Відношення знаходиться в 1НФ, якщо домен кожного атрибута містить тільки атомарні значення і значення кожного атрибуту набувають тільки повних значень з цього домену". З появою складних типів даних в СУБД, поняття 1НФ уточнювалося наступним чином: "Змінна-відношення знаходиться у 1НФ тоді і тільки тоді, коли в кожному її допустимому значенні кожний кортеж містить тільки одне значення для кожного атрибуту" [10]. У 1971 р. Е.Ф. Кодд вказує на надлишковість даних та аномалії, які виникають при здійсненні операцій над відношеннями, вперше представляє концепцію функціональної залежності (ФЗ), демонструє можливість її використання для розв'язання проблем проектування БД, наводить означення другої нормальної форми (2НФ), транзитивної ФЗ та третьої нормальної форми (3НФ).

Означення транзитивної ФЗ (див. наприклад, фундаментальну монографію Е.Ф. Кодда [22]) сформульоване Коддом у вигляді: "Нехай A, B і C різні атрибути у відношенні і нехай вони задовольняють наступним умовам: виконуються ФЗ $A \to B$, $B \to C$ та не виконується ФЗ $B \to A$. Тоді ФЗ $A \to C$ називається транзитивною залежністю", на даний час має два уточнення [21]:
1) атрибут $C \notin A \cup B$, де A і B – множини атрибутів [4]; дана умова виключає з розгляду тривіальні ФЗ (ФЗ називається тривіальною, якщо її права частина є підмножиною лівої);
2) $B \nsubseteq A$, де A і B – множини атрибутів [23]; цим також виключаються тривіальні ФЗ в посилці $A \to B$.

Для приведення відношення до 3НФ користуються багатьма алгоритмами [23]. Так, Хез (Heath) сформулював теорему, яка обґрунтовувала приведення відношення до 3НФ за допомогою декомпозиції без втрат відношення $R(A, B, C)$ на проекції $R_1 = \pi_R(A, B)$ та $R_2 = \pi_R(A, C)$ за умови виконання ФЗ $A \to B$. Також на сьогодні відомими класичними алгоритмами зведення схеми відношення до 3НФ є алгоритми Ульмана, Делобеля-Гейсі (Delobel-Gasey), результатами яких не завжди є схема у 3НФ, Берштейна (Bernstein), Ісlура (Isloor), Неклюдової-Цаленка, який дає кількісно оптимальну схему БД; оригінальний алгоритм зведення схеми відношення до 3НФ через побудову так званих кільцевих покриттів запропонував Мейер [5]. Переваги та недоліки більшості з вказаних алгоритмів, а також їх відповідність різним визначенням еквівалентності реляційних схем розглянуті у монографії В.П. Дрібаса [23]. Пошук ефективних алгоритмів розв'язання задачі синтезу оптимальної схеми БД у 3НФ продовжується і сьогодні (див. огляд [21]).

Об'єктні БД. Складна будова об'єктивної дійсності спонукає людину використовувати класифікаційні схеми, які дозволяють цілісно представляти цю реальність у вигляді об'єктів. Тому абсолютно природнім стало впровадження підтримки об'єктного підходу в мови програмування та в БД, зокрема. В основі об'єктного підходу лежить ОМД. В [11] ця модель визначається як модель, що враховує семантику об'єктів – головного поняття ООП. Основна ідея об'єктного підходу полягає в об'єднанні даних і операцій, які виконуються над цими даними, в одне концептуально замкнуте поняття – клас. Дані класу не повинні змінюватися ззовні, а доступ до даних слід здійснювати тільки через функції-члени (методи класу). Програма, яка написана на об'єктній мові, взаємодіє з сукупностю об'єктів, кожен з яких належить до певного АТД (класу) і має інтерфейс у вигляді сукупності методів для взаємодії з іншими об'єктами за допомогою повідомлень.

Розробка систем об'єктних БД (ОБД) розпочалася в 80-х роках минулого століття в зв'язку з впровадженням складних програмних додатків, пов'язаних з автоматизованим проектуванням (Computer Aided Design – CAD), автоматизованим виробництвом (Computer Aided Manufacturing – CAM), системами, які основані на знаннях, тощо. Використання реляційного підходу в таких застосуваннях показало його неефективність. Іншими словами, поява ОБД була зумовлена більш адекватним представленням та моделюванням сутностей реального світу в ОБД в порівнянні з реляційними БД.

Об'єктна теорія побудована з використанням базових понять об'єктного підходу Г. Буча та трикутника Г. Фреге, виходячи з наступних принципів [24, 25]:

- загальності об'єктного визначення: всі сутності – об'єкти;
- унікальності: кожен об'єкт – унікальний елемент;
- об'єктної впорядкованості: всі об'єкти впорядковані у відповідності з певними відношеннями;
- цілісності об'єктної моделі: об'єкти і відношення між ними однозначно визначаються в моделі на певному рівні абстракції;
- інтероперабельності об'єктів: об'єкти пов'язуються операціями викликів на множинах вхідних і вихідних інтерфейсів.

Треба зазначити, що об'єктному підходу в програмуванні та в БД присвячено багато праць. Та, відповідно, існує багато визначень ООП та ООБД. Ми будемо визначати ООБД, як БД, в яких об'єктний підхід поєднується з функціональністю БД. Цей підхід надає можливість більш точно моделювати предметну область. В свою чергу, функціональність об'єктних СУБД потрібна для забезпечення цілісності даних, а також паралельного доступу до них. Використання ООП надає суттєві переваги ООБД. Спільним для різних ООБД є використання об'єктно-орієнтованих мов програмування, основними властивостями яких є інкапсуляція, поліморфізм, успадкування. Отже, формалізація успадкування класів є кроком у створенні загального підходу до побудови ООБД та їхньої роботи в цілому.

Обов'язковою складовою ОБД є, по-перше, можливість маніпулювання об'єктами, що представляються у вигляді сутностей в адресному просторі обчислювальної системи, яка з'являється при створенні екземпляра класу, та, по-друге, використання концепцій ООП. Разом з цим, кожна одиниця (об'єкт) інформації в таких БД володіє двома характеристиками: станом та поведінкою. Стан визначається сукупністю поточних значень атрибутів та зв'язків, які має об'єкт. Значеннями атрибутів можуть виступати як елементи примітивних (системних) типів даних, так і інші об'єкти. Останній факт дає можливість визначати об'єкт рекурсивно через інші об'єкти. Стан визначає реакцію об'єкта на подію, яка в нього поступає. Об'єкт зберігає свій стан на протязі часу між двома послідовними подіями, які він приймає.

Поведінка визначається можливістю об'єкта реагувати на дії ззовні. Реагування на дії ззовні відбувається через методи об'єкта, які в нього інтегровані. Кожен об'єкт в БД володіє унікальним ідентифікатором OID (Object Identifier). Об'єкти, які мають однакові схеми та поведінку, групуються в класи, створюючи при цьому інстанс (instance) класу. Об'єкт може належати як інстансу одного класу, так і інстансу декількох класів у випадку звичайного та множинного успадкування [26].

Існує наступна відмінність у використанні типів даних атрибутів. Так, в реляційній БД, як правило, атрибути мають прості (примітивні) типи даних, а в ООБД значеннями атрибутів можуть бути складні типи даних. Причому складні типи даних можуть бути вбудовані в СУБД, а можуть бути створені користувачем (user-defined types).

Запити в об'єктних БД. Для опису та маніпулювання інформацією в об'єктних БД використовують відповідні мови. За аналогією з реляційними СУБД в об'єктних існує мова опису об'єктів ODL (Object Definition Language), що

дозволяє описати структуру даних та схему БД для об'єктної моделі, розробленої консорціумом ODMG (Object Database Management Group), та мова OQL (Object Query Language), що слугує для пошука об'єктів у БД. З іншого боку, існують такі об'єктні СУБД (NeoDatis, db4o, objectdb, тощо), в яких створення схеми класу та екземплярів класу покладається на мову програмування (Java, C++, тощо). Такі СУБД надають користувачу бібліотеки (класи) для взаємодії з БД.

В кожній розвиненій об'єктній СУБД присутні наступні операції над об'єктами, які можна позначити абревіатурою CRUD: створення об'єкту та поміщення його в БД (Create, Storing), зчитування об'єкту з БД (Retriving), зміна об'єкту з подальшим його записом в БД (Update), знищення об'єкту з БД (Deleting).

На відміну від реляційних СУБД, в яких існує єдиний підхід до реалізації вибірки даних (мова SQL), в об'єктних СУБД існує декілька шляхів реалізації цієї можливості: Java Persistence Query Language (JPQL), Query by Example (QBE), Native Queries (NQ), Simple Object Database Access (S.O.D.A) та інші. Реалізацію вибірки даних обирає безпосередньо користувач ООБД в залежності від поставленої задачі.

Об'єктно-реляційні БД (ОРБД). В основі функціонування об'єктно-реляційних БД лежить інтеграція елементів ОМД в реляційну модель. Фактично ОРБД представляє собою розширення функціональних можливостей реляційних БД. Прикладами такого розширення може виступати:
1) збереження в атрибуті значень складних типів даних;
2) реалізація успадкування таблиць;
3) надання рядку таблиці об'єктного ідентифікатора, який відіграє роль первинного ключа (primary key) таблиці.

Зауважимо, що реалізація ідей об'єктного підходу для реляційних БД дещо відрізняється від реалізації безпосередньо в об'єктному підході. Покажемо це на прикладі. Розглянемо успадкування таблиць в об'єктно-реляційній СУБД postgresql v. 9.2. Нехай маємо дві таблиці cities (міста) та capitals (столиці). Створимо ці таблиці (тобто задамо їх імена та схеми):

```
CREATE TABLE cities (
name       text,
population real,
altitude   int );
```

```
CREATE TABLE capitals (
  state    char(2)
) INHERITS (cities);
```

Таблиця capitals успадковує всі атрибути батьківської таблиці cities. Тоді, коли додається запис в таблицю capitals, цей же запис додається в таблицю cities (без атрибута state). Як відомо, в ООП при створенні об'єкта похідного класу цей об'єкт не створюється в батьківському класі.

Object Relation Mapping (ORM). Слід відмітити, що існує принципова можливість перетворити об'єктну модель в реляційну. При такому підході, в загальному випадку, кожному класу буде відповідати певне відношення (таблиця). Хоча програмні системи, які реалізовують ORM, можуть одному класу співставити більше ніж одну реляційну таблицю та декільком класам співставити одну реляційну таблицю. Атрибути класу стануть атрибутами відповідного відношення, а екземпляру класу буде відповідати певний рядок у відношенні. Цю можливість можна реалізувати за допомогою так званого відображення клас-відношення (ORM – Object Relation Mapping). Така задача виникає у випадку, коли прикладна програма, що виступає клієнтом по відношенню до БД, реалізована на об'єктно-орієнтованій мові програмування, а дані зберігаються в реляційній БД.

Щодо практичної реалізації, то існує багато програмних продуктів, які надають можливість користування ORM. Серед таких програм слід виділити Hibernate. Крім того, можна здійснювати зворотне перетворення реляційної моделі в об'єктну. Така задача може виникнути, коли ми хочемо в об'єктному стилі переписати програму-клієнт, створену для роботи з реляційною БД [27].

NoSQL БД. З кожним роком кількість інформації, яка повинна зберігатися та оброблюватися в БД, стрімко зростає. Також сучасні СУБД стикаються з інформацією, яка не є структурованою, зростають вимоги до надзвичайно швидкого виконання запитів та оновлення фізично розподілених даних. Ця тенденція вимагає постійного підвищення функціональних можливостей як серверів (hardware: підвищення тактової частоти процесорів, пам'яті, зменшення часу запису-зчитування інформації з накопичувачів), так і реалізації механізмів підвищення швидкодії роботи з інформацією в самої БД на логічному рівні (software). Якщо розглянемо реляційні БД, то для підтримки цілісності та прискорення виконання запитів на великому об'ємі інформації були реалізовані механізми: нормалізація, денормалізація та шардінг (sharding, так зване вертикальне та горизонтальне масштабування, яке є архітектурним рішенням). Суть шардінгу полягає в розділенні БД на окремі частини з подальшим перенесенням цих частин на окремі сервери. Шардінг можно розділити на два типи: вертикальний та горизонтальний. Вертикальний шардінг – це спосіб виділення таблиці або

декількох таблиць з метою подальшого перенесення на інший сервер БД. Горизонтальний шардінг – це спосіб розділення однієї таблиці на частини з метою перенесення кожної частини на окремий сервер. І ці механізми давали певний час змогу пришвидшити роботу реляційних БД, в якій зберігається досить велика кількість інформації. Але з часом навіть ці механізми не дозволяли виконувати покладені на них завдання по обробці великих об'ємів інформації. В результаті перед розробниками програмного забезпечення постало завдання знайти нові механізми пришвидшення обробки інформації в БД. Це і дало поштовх для розвитку нового типу БД – NoSQL (Not Only SQL – не тільки SQL). Зауважимо, що термін NoSQL визначає скоріше напрямок розвитку БД, а ніж технологію. За моделлю даних БД типу NoSQL можна умовно поділити на 4 типи:

- документо-орієнтовані (OrientDB, MongoDB);
- БД типу "ключ-значення" (Redis, Memcached);
- стовпцеві БД (Cassandra, HBase);
- графові БД (OrientDB, HyperGraphDB, Infinite Graph).

Треба зауважити, що існують такі NoSQL СУБД, які не можна однозначно віднести до якогось одного з перелічених вище типів. Це пов'язано з тим, що границі між вказаними вище моделями даних дуже часто розмиті і такі БД не можна однозначно віднести до одного типу. Наприклад, СУБД OrientDB можна одночасно віднести як до типу документо-орієнтованих, так і графових.

Незважаючи на те, що NoSQL СУБД мають переваги, в першу чергу для обробки і збереження великої кількості інформації, вони все ж таки мають недолік, а саме можливість агрегувати структури даних. В цьому контексті реляційні БД мають перевагу завдяки відсутності агрегатної структури, яка дозволяє здійснювати різноплановий доступ до даних. Окрім цього, вони забезпечують зручний механізм, який дозволяє здійснювати пошук даних незалежно від того, як ці дані зберігаються [28]. Тому при виборі відповідної моделі даних (СУБД) потрібно підходити виважено.

Поширене використання NoSQL БД призвело до створення формальних моделей таких БД. Так, в роботі [29] побудовано дві моделі даних, що уточнюють структури даних документо-орієнтованих БД. В основі побудови першої моделі лежить теорія множин, в основі другої – теорія мультимножин, яка дає можливість використовувати дублікати записів в межах одного документа. Введено відношення піддокументу та підзапису, які уточнюють входження одного документа в інший.

Висновки. В статті зроблений аналіз типів БД, які поширено використовуються в інформаційних системах. Розповсюджене використання, стабільність роботи реляційних БД забезпечується наявністю формальних моделей та мови запитів SQL. Розглянуті характеристики мови SQL, а також мов запитів для інших типів БД. Для реляційних СУБД існує єдиний підхід до реалізації вибірки даних (мова SQL), в об'єктних СУБД єдиного підходу не існує. Для об'єктних (постреляційних), NoSQL БД також побудовані формальні моделі, які описують роботу таких БД.

Список використаних джерел

1. *Буй Д.Б.* Сложность операций в базах данных (Обзор) / Д.Б. Буй, В.Г. Скобелев // Радиоэлектронные и компьютерные системы. Харків. "ХАІ". – 2014. – №2 (66). – С. 53-59.

2. *Klein, B.* An Introduction to IMS. Second Edition / B. Klein, R. Long, K. Ray // IBM Press, 2012, 622 p.

3. *Codd, E.F.* A Relational Model of Data for Large Shared Data Banks / E.F. Codd // Communications of the ACM. – 1970. – Vol. 13, num. 6. – P. 377-387.

4. *Мейер Д.* Теория реляционных баз данных: [пер. с англ.] / Д. Мейер. – Москва: Мир, 1987. – 608 с.

5. *Редько В.Н.* Реляційні бази даних: табличні алгебри та SQL-подібні мови / В.Н. Редько, Ю.Й. Брона, Д.Б. Буй, С.А. Поляков. – К.: Видавничий дім "Академперіодика", 2001. – 196 с.

References

1. BUI, D., SKOBELEV, V. (2014) *Complexity of operations in database systems (a survey).* Radioelectronic and computer systems 66 (2), pp. 53-59.

2. KLEIN, B., LONG, R. RAY, K. (2012) *An Introduction to IMS. Second Edition*. IBM Press.

3. CODD, E. (1970) A Relational Model of Data for Large Shared Data Banks. *Communications of the ACM*. Vol. 13 (6), pp. 377-387.

4. MAIER, D. (1983) *The theory of relational databases*. Computer Science Press.

5. REDKO, V., BRONA, Y, BUY, D, POLYAKOV, S (2001) *Relyacionnie bazy dannych: tablichny algebry ta SQL-podibni movy*. K.:Academperiodika.

6. *Кирстен В.* Постреляционная СУБД Cache. Объектно-ориентированная разработка приложений / Вольфанг Кирстен, Михаэль Ирингер. – М.: Бином, 2008. – 401 с.
7. *Фридман А.Л.* Основы объектно-ориентированной разработки программных систем / А.Л. Фридман – М.: "Финансы и статистика", 2000. – 190 с.
8. *Cook, W.* Object-Oriented Programming Versus Abstract Data Types [Online] – Hewlett-Packard Laboratories. Available from: www.cs.utexas.edu/users/wcook/papers/OOPvsADT/CookOOPvsADT90.pdf
9. *Bubel R.* A Formalisation of Java Strings for Program Specification and Verification [Online] . – Available from: http://202.154.59.182/mfile/files/Information%20System/Software%20Engineering%20and%20Formal%20Methods%3B%209th%20SEFM%202011/Chapter%208%20A%20Formalisation%20of%20Java%20Strings%20for%20Program%20Specification%20and%20Verification.pdf
10. *Дейт К.Дж.* Введение в системы баз данных, 8-е издание.: Пер. с англ. / К.Дж. Дейт. – М., СПб, Киев: "Вильямс", 2005. − 1328 с.
11. *Конолли Т.* Базы данных. Проектирование, реализация и сопровождение. Теория и практика. Третье издание / Т. Конолли, К. Бегг. – Москва-Санкт-Петербург-Киев, 2003. – 1427 с.
12. *Кренке Д.* Теория и практика построения баз данных / Д. Кренке. – СПб.: Питер, 2003. − 800 с.
13. *Тиори Т.* Проектирование структур баз данных. Кн. 1. / Т. Тиори, Дж. Фрай. – М.: Мир, 1985. – 275 с.
14. *Гарсиа-Молина Г.* Системы баз данных. Полный курс.: Пер. с англ. / Гектор Гарсиа-Молина, Джеффри Д. Ульман. – М.: Издательский дом "Вильямс", 2003. – 1088 с.
15. *Бурлаков П.В.* Введение в системы баз данных. Учебное пособие / П.В. Бурлаков, В.Ю. Петров. – Санкт-Петербург, 2010. – 129с.
16. *Грей П.* Логика, алгебра и базы данных. – М.: Машиностроение, 1989. – 360 с.
17. *Редько В.Н.* К основаниям теории реляционных моделей баз данных / В.Н. Редько, Д.Б. Буй // Кибернетика и системный анализ . – 1996. – №4. – С. 3-12.
18. *Поляков С.А.* Композиційна семантика ядра SQL-подібних мов. Дисертація на здобуття вченого ступеня кандидата фізико-математичних наук: спец. 01.05.03 "Математичне та програмне забезпечення обчислювальних машин і систем" – К.: 2011.– 118 с.

6. KIRSTEN, V. et al. (2003) *A post-relational database Cache. Object-oriented application development.* Springer.

7. FRIDMAN, A. (2000) *Fundamentals of object-oriented software development.* Moskov:Financy i statistika.

8. COOK, W. (1990) *Object-Oriented Programming Versus Abstract Data Types.* [Online] Hewlett-Packard Laboratories. Available from: www.cs.utexas.edu/users/wcook/papers/OOPvsADT/CookOOPvsADT90.pdf
9. BUBEL, R. (2011) *A Formalisation of Java Strings for Program Specification and Verification* [Online] . – Available from: http://202.154.59.182/mfile/files/Information%20System/Software%20Engineering%20and%20Formal%20Methods%3B%209th%20SEFM%202011/Chapter%208%20A%20Formalisation%20of%20Java%20Strings%20for%20Program%20Specification%20and%20Verification.pdf
10. DATE, C.J. (2003) *Introduction to Database Systems, 8th Edition.* Addison-Wesley.

11.CONOLLY, T., BEGG C. (2002) *Database systems. A practical approach to Design, Implementation, and Management. Third edition.* Addison-Wesley.

12.KROENKE, D. (2002) *Database processing. Fundamentals, Design, and Implementation.* Prentice Hall.
13. TEOREY, T. (1999) *Database Modeling and Design.* Morgan Kaufman.
14. GARSIA-MOLINA, H. at al. (2001) *Database Systems: The Complete Book.* Prentice Hall.

15.BURLAKOV, P. (2010) *Vvedenie v systemii baz dannych.Uchebnoe posobie.* S.-Peterburg.

16. GREY, P. (1989) *Logika, algebra i bazy dannych.* M.:Mashinostroenie

17. REDKO, V., BUY, D. (1996) *On the foundations of the theory of relational database models.* Cybernetics and Systems Analysis. No 4. – pp. 3-12.

18. POLYAKOV, S. (1999) Compositional semantics of SQL-like language: tabular data structure, composition, examples. *Bulletin of Kiev University. August. Sci. science*. Vol. 1, 2. – pp. 130-140, pp. 183-194.

19. *Глушко І.М.* Числення та розширення сигнатур табличних алгебр. Дисертація на здобуття вченого ступеня кандидата фізико-математичних наук: спец. 01.05.01 – К.: 2013. – 142 с.

20. *Редько В.Н.* Экзистенциальные основания композиционной парадигмы / В.Н. Редько // Кибернетика и системный анализ. – 2008. – № 2. – С. 3-12.

21. *Буй Д.Б.* Обзор современной теории нормализации в реляционных базах данных / Д.Б. Буй, А.В. Пузікова // Материалы XVII Международной конференции "Проблемы теоретической кибернетики" (Казань, 16 – 20 июня 2014 г.). Под редакцией Ю.И. Журавлева. – Казань: Отечество, 2014. – С. 39-43.

22. *Codd E.F.* A Relational Model of Database Management : version 2. / E. Codd. – Addison-Wesley, 1990. – 567 p.

23. *Дрибас В.П.* Реляционные модели баз даннях / *В.П.* Дрибас. – Минск: Белорус. ун-т, 1982. – 192 с.

24. *Лаврищева Е.М.* Software engineering комп'ютерних систем. Парадигми, технологии, Case-инструменты программирования / Е.М. Лаврищева. – К.: "Наукова думка", 2013. – 282 с.

25. Abadi M. A theory of objets [Електронний ресурс] / M. Abadi, L. Cardelli. – Springer, 1996. – 524 p. – Режим доступу: http://books.google.om.ua/books?id=4xT3LgCPP5UC

26. *Bagui Sikha*. Achievements and Weaknesses of Object-Oriented Databases / Sikha Bagui // Journal of object technology, vol. 2, № 4, July-August 2003. pp. 29-41.

27. *Кунгурцев А.Б.* Математическая модель объектного представления реляционной базы данных / А.Б. Кунгурцев, А.С. Неизвестный // Труды Одесского политехнического университета. – Одеса, 2007. – Вип. 1(27). – С. 130-134

28. *Прамодкумар Дж. Садаладж*. NoSQL. Новая методология разработки нереляционных баз данных / Дж. Садаладж Прамодкумар, Мартин Фаулер. – М.: Вильямс. – 2013. – 192 с.

29. *Buy Dmitriy*. Formal specification of the NoSQL data model / Dmitriy Buy, Sergey Polyakov, Iuliia Hryshko // Informatics'2013, November 5th-7th, Spiska Nova Ves, 2013, pp. 284-288.

19. BUY, D., HLUSHKO, I. (2011) Table algebras of infinite (finite) tables, corresponding relational calculi and theirs equivalence. *"COMPUTER SCIENCE & ENGINEERING 2011" (CSE-2011), 24-26 NOVEMBER 2011, LVIV, UKRAINE*

20. REDKO, V. (2008) *Existential foundation compositional paradigm.* Journal "Cybernetics and systems analysis", no. 2., pp. 3-12.

21. BUI, D., PUZIKOVA, A. (2014) Obzor sovremennoy teorii normalisatsii v relyacionnych baz dannych. *Proceedings of the XVII International Conference "Problems of Theoretical Cybernetics"*, 16 – 20 June, Kazan, pp. 39-43.

22. CODD, E. (1990) *A Relational Model of Database Management: version 2.* / E. Codd. – Addison-Wesley, 1990. – 567 p.

23. DRIBAS, V. (1982) *Relyacionnie modeli baz dannich*. Minsk: Belorus. Universitet.

24. LAVRISHCHEVA, E (2013) *Software engineering komputernych system. Paradigmy, tehnologii, Case-instrumenty programmi-rovaniya*. K.:"Naukova dumka".

25. ABADI, M, CARDELLI, L. (1996) *A theory of objets*, Springer [Online] . – Available from: http://books.google.om.ua/books?id=4xT3LgCPP5UC

26. BAGUI, SIKHA (2003) *Achievements and Weaknesses of Object-Oriented Databases* / Sikha Bagui // Journal of object technology, vol. 2(4). pp. 29-41.

27. KUNGURTSEV, A.B., NEIZVESTNY,A.S. (2007) *Mathematical model of objective representation of a relational database*. Proceedings of the Odessa Polytechnic University. 27(1). pp. 130-134.

28. SADALAGE, J. PRAMOD, FOWLER, MARTIN (2012) NoSQL Distilled: *A Brief Guide to the Emerging World of Polyglot Persistence*. Addison-Wesley Professional.

29. BUY, D., POLYAKOV, S., HRYSHKO, Y. *Formal specification of the NoSQL data model*. Informatics'2013, November 5th-7th, Spiska Nova Ves, 2013, pp. 284-288.

Надійшла до редколегії 27.08.14

УДК 004.891.2

Конюшенко О. В.[1], аспірант.

Реалізація системи персоналізованого пошуку на основі аналізу діяльності членів віртуальної спільноти

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

O. V. Konyushenko[1], PhD student.

Implementation of personalized search system based on the analysis of the activity of the members of the virtual community

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

У статті детально представлені математичні моделі, на основі яких функціонує розроблена система персоналізованого пошуку, яка дозволяла б здійснювати пошук документів тематичного порталу з урахуванням результатів кооперативної діяльності віртуального співтовариства порталу по оцінці документів, охарактеризовані основні аспекти її роботи, представлена архітектура.

Ключові слова: персоналізований пошук, віртуальні спільноти, генетичні алгоритми, тематичні портали

Detailed mathematical models presented in this article formed a strong background for designed system of personalized search that should allow to search documents in thematic portal based on the results of the cooperative activity of an portal virtual community on the evaluation of documents; in article described main aspects of its work and architecture.

User level of interest in information section of documents, determined by informational portrait of this person. Informational portrait of the user based on vector: elements are concepts with weight which indicating level of interest in concept of the user.

User interface was expanded with module which collect and analyze user actions concerning resources evaluation. To make an initial relevant determination of finding certain resource, system uses the functionality of basic search engine with subsequent change based on alorithms of personalization and consideration of the performance of virtual communities.

Keywords: personalized search, virtual communities, genetic algorithms, thematic portals

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Анісімов А. В.

Вступ

У зв'язку із збільшенням об'єму даних, розміщених в Internet і корпоративних базах даних, актуальною стає проблема підвищення якості пошукових і навігаційних систем [1]. Наразі більшість пошукових систем можуть дізнаватися про інформаційну потребу користувача тільки за допомогою ключових слів, які задані в запиті. При цьому, система не має в своєму розпорядженні відомостей про контекст, в якому користувач вживає ці слова. Та і самому користувачеві буває важко підібрати ключові слова, які точно описують тематику, що його цікавить. Пошукова система надає користувачеві результати, відсортовані за релевантністю до запиту. При цьому враховується текст документів або структура посилань між ними, але не враховується ряд інших факторів, які могли б покращити якість пошуку [2,3], зокрема:

- коло інтересів і індивідуальні особливості користувача, який веде пошук;
- результати кооперативної діяльності віртуального співтовариства по оцінці якості ресурсів.

Перший з цих факторів можна охарактеризувати як проблему впровадження персоналізованого пошуку, другий – поширення впливу результатів діяльності одного користувача (зокрема, оцінювання якості ресурсів) на результати пошуку інших, що в перспективі може призвести до підвищення ефективності пошуку.

© О. В. Конюшенко, 2014

Щодня пошукові системи отримують запити від користувачів, які вибирають результати, що їх зацікавили. Цю інформацію пошукові системи збирають, систематизують і видають у вигляді цифр статистики: популярності запитів, інтересів, рейтингів тощо. Зрозуміло, ці цифри загальні і не відносяться до конкретної людини. Але при впровадженні засобів однозначної ідентифікації користувача дістаємо можливість збору інформації про конкретного користувача. Спеціалізована обробка цієї інформації дозволяє дізнатися багато цікавого про користувача, що може стати привабливим при формуванні індивідуальних результатів видачі на запит. Сама процедура пошуку значно спрощується, оскільки пошукова машина вже «знає» багато чого про його потреби і інтереси. Це і називають персоналізацією пошуку [4].

Актуальність досліджень у цій галузі підтверджується як діяльністю багатьох наукових спільнот у цьому напрямку, так і впровадженням систем, які реалізують дані ідеї, великими корпораціями, що представлені на ринку пошуку інформації. Зокрема, відносно недавно компанія Google представила свій сервіс персоналізованого пошуку Вікіпошук (SearchWiki) [5]. Але сервіс має ряд обмежень, спричинених природою Internet. З огляду на це, було прийнято рішення про проведення досліджень в цій галузі на базі окремого веб-порталу.

Мета роботи полягає у розробці основних принципів функціонування та впровадженні системи персоналізованого пошуку, яка дозволяла б здійснювати пошук документів тематичного порталу з урахуванням результатів кооперативної діяльності віртуального співтовариства порталу по оцінці якості документів.

Побудова «інформаційного портрета користувача»

Інформаційним портретом користувача (ІПК) називатимемо набір параметрів і їх значень, що описують сферу інтересів користувача та галузі знань, які його цікавлять [6].

Зазвичай, під ІПК розуміється вектор, елементами якого є поняття з вказівкою ваги, що характеризує міру зацікавленості ним користувача. Такий портрет можна складати методом попереднього анкетування користувача або враховуючи активність користувача при роботі з інформаційними ресурсами. Перший спосіб вважається дуже трудомістким, таким що вимагає з одного боку складання тестових наборів, які охоплюють різні галузі знань, а з іншого боку, великих зусиль і тимчасових витрат при проходженні користувачем цих тестів. Проте, тести можна використовувати для первинного наближеного формування інформаційного портрета. Другий підхід не вимагає від користувача великої кількості додаткових дій і потенційно забезпечує більшу точність.

Для побудови ІПК традиційно використовують персональні програмні агенти або персоніфікацію пошукової системи [7]. У першому випадку система будує портрет на основі документів, що переглядаються користувачем, з різних джерел. У другому, система відстежує документи, відібрані користувачем в результатах, виданих по запиту конкретною пошуковою системою.

У обох випадках в основі можуть лежати одні і ті ж алгоритми побудови ІПК. Відмінність в тому, що персональний агент будує вектори документів нальоту, а персоніфікатор пошукової системи може використовувати вектори документів, визначені раніше при індексуванні.

Зазвичай застосовують спосіб побудови ІПК, при якому система класифікує вибрані користувачем документи відповідно до деякої онтологічної структури [8]. Категорії онтології, в які попало більше документів, складають ІПК. Документ співвідноситься з категорією на основі скалярного добутку їх n-вимірних векторів. Реалізації відрізняються способом побудови n-вимірного простору і методом обчислення скалярного добутку. Як координати зазвичай використовують ключові слова і їх ваги.

Можна вважати, що задача формування ІПК зводиться до задачі автоматичної категоризації текстів. Проте для навчання більшості систем категоризації потрібна вже готова структура категорій з великою навчальною вибіркою по кожній категорії. Такі структури дуже загальні і не завжди адекватні інтересам користувачів. У зв'язку з цим більший інтерес становлять алгоритми, які ефективно вирішують дану задачу в умовах малих навчальних вибірок, коли навчання починається з одного-двох документів, і система класифікації перенавчається при додаванні нового документа.

Системи побудови ІПК також розрізняються способом отримання оцінки користувачем документа. Це може відбуватися в автоматичному або ручному режимі. Наприклад,

якщо користувач переглядає документ довше певного часу, то вважається, що користувач оцінив документ позитивно. У ручному режимі користувач явно вказує, які документи він вважає відповідними запиту. В будь-якому випадку, система оцінювання має бути організована так, щоб забезпечувати достатню точність при невеликих зусиллях з боку користувача.

З огляду на вищесказане, у нашій системі ІПК реалізується вектором, елементами якого є поняття з вказівкою ваги, що характеризує міру зацікавленості поняттям користувача. У пошуковій історії зберігаються всі запити користувача та позначаються всі документи які він оцінив при цьому запиті, оскільки припускається, що тільки у разі відповідності документа його інформаційним потребам він прочитає його та залишить оцінку в системі.

Міра зацікавленості користувача *u* в категорії *i* визначається як

$$c_{ui} = \frac{\sum_j \left(w_j^u \times w_j^i\right)}{\sqrt{\sum_j \left(w_j^u\right)^2} \times \sqrt{\sum_j \left(w_j^i\right)^2}}, \text{де}$$

w^i – інформаційний портрет розділу *i*, який формується наступним чином

$$w_j^i = \begin{cases} w_j^u, \text{якщо поняття } j \\ \text{відноситься до розділу } i \\ 0, \text{інакше} \end{cases}$$

w^u – інформаційний портрет користувача *u*.

Компоненти ІПК можуть змінюватись ґрунтуючись на пошуковому запиті, оцінюванні ресурсу при певному пошуковому запиті. Тобто $w_j = w_j + \frac{K}{n_l} * damp(q^s)$ за умови, що термін l запиту q^s відповідає терміну w_j, де n_l – число розділів, до яких можна віднести термін q_l^s,

$$K = \begin{cases} k1, \textit{якщо термін } q_l^s \textit{ відповідає терміну } w_j \\ k2, \textit{якщо термін } q_l^s \textit{ відповідає терміну } w_j \\ \textit{та була отримана оцінка ресурсу} \end{cases}$$

Далі отриманий вектор w^u нормується $w_j^u = \frac{w_j^u}{\sqrt{\sum_l w_l^u}}$. Функція *damp(q)* дозволяє здійснити пріоритизацію більш нових пошукових історій над більш старими без виключення останніх. Загальний вигляд цієї функції $damp(q^s = \frac{k}{p(s)})$, де k – певний коефіцієнт, s – значення яке характеризує давність запиту (порядковий номер, дата), *p(s)*– певна монотонно незростаюча функція, яка характеризує давність повідомлення.

Також система передбачає автоматичне додавання до інформаційних портретів нових понять. При аналізі пошукових запитів і оцінених ресурсів можуть виявлятися поняття, які не входять до інформаційного портрету, але, як виявляється, певним чином характеризують той чи інший розділ. Наприклад, є певне поняття *t*, якого немає в інформаційних портретах, але воно вживається в ряді запитів *{q1,..., qm }*, після видачі яких були оцінені ті чи інші ресурси. Якщо певні характеристики таких дій, зокрема кількість та частота, будуть перевищувати певне порогове значення, система може прийняти рішення про включення цього поняття в інформаційні портрети. Розділ або розділи, до яких буде віднесене це поняття будуть визначатися розділами документів, оцінених при роботі з запитами, до якого це поняття входило.

Побудова оцінок цінності документів та компетентності користувачів

Одне з головних завдань у нашій пошуковій системі є обробка інформації про якість того чи іншого ресурсу веб-порталу з врахуванням інформаційних потреб конкретного користувача.

Релевантність документа запиту у даній системі буде визначатися за формулою *R=R1+R2*, де *R1* – релевантність, отримана за допомогою базової пошукової системи, *R2* – оцінка якості документа, яка визначається розробленими у цій роботі методами, що будуть розглядатися далі.

Величина *R2* в свою чергу визначатиметься наступним чином:

$$R2 = k\frac{\sum_{i=1}^{n} R_i}{n}$$

де n – кількість розділів, до яких віднесений даний документ, R_i – оцінка якості документу відносно розділу *i*, *k* – коефіцієнт.

Передбачається, що якість документа для користувача у певному розділі залежить від власне цінності ресурсу відносно цього розділу та зацікавленості у розділі користувача. Пов'язуються ці величини функцією:

$$R_i = f(c_i, v_i)$$

де c_i– міра зацікавленості користувача у розділі i, v_i– цінність матеріалу відносно розділу i. Функція, яка використовується при обчисленні цієї величини задається наступним чином:

$$f(a,b) = \begin{cases} a*b, b \geq 0 \\ (2-a)*b, b < 0 \end{cases}$$

Враховуючи, що в даній системі зацікавленість користувача може бути представлена числом з інтервалу $c \in [0..1]$, а оцінка цінності ресурсу може бути від'ємною, наведена формула дозволяє коректно обробляти всі випадки.

Міра зацікавленості користувача у розділі визначається інформаційним портретом користувача. Інший фактор, який використовується при оцінці якості ресурсу – цінність матеріалу відносно певного розділу визначається наступним чином

$$v_i = \frac{\sum_{j=1..n} mark * a_{ij}}{n}$$

де a_{ij}– авторитет користувача j у розділі i, *mark* – оцінка користувача ресурсу. Варто зазначити, що користувач може оцінювати певний ресурс наступними оцінками: «*very bad*», «*bad*», «*normal*», «*good*», «*very good*», які відображаються в системі відповідно значеннями *-1, -0.5, 0, 0.5, 1*.

Авторитет користувача j у розділі i визначається наступним чином.

Початкове значення $a_{ij}=0$.

Після нових оцінювань матеріалів авторитети користувачів перераховуються за наступними формулами:

$$\Delta a_{ui} = K \frac{\sum_{j=1..n, j \neq u} d * f(c_{ij}, a_{ij})}{(n-1)}$$

$$\text{де } d = \begin{cases} 1, \text{ якщо } mark_j = mark_u \\ 0.5, \text{якщо } \left| mark_j - mark_u \right| = 0.5 \\ -\left| mark_j - mark_u \right|, \text{інакше} \end{cases}$$

Δa_{ui} – зміна авторитету користувача u в розділі i, K – коефіцієнт.

Загальна архітектура функціонування системи

У ході реалізації системи пошуку інформації тематичного веб-порталу було прийнято рішення вести її розробку на базі вже розробленої пошукової системи, яка має надавати наступні сервіси: індексування ресурсів порталу, пошук і визначення базових оцінок релевантності документів. Потім ця система повинна розширитися модулями представлення додаткових елементів інтерфейсу, які дозволяли б проводити роботу з розширеним функціоналом базової системи, модулями прийому та обробки наданої користувачем інформації.

З огляду на все вищезазначене було сформовано ряд вимог до базової пошукової системи:

- повинна бути з відкритим кодом (open-source), це необхідно як для додавання нових модулів до системи, так і для можливості певної адаптації її коду до вимог системи, яка розробляється;
- має мати достатньо розвинуті можливості у сфері пошуку та ранжування ресурсів;
- повинна мати індексатор, який добре працює як з текстами написаними латиницею, так і кирилицею.

Однією з пошукових систем, яка задовольняє цим умовам, є система PhpDig [9] , яка і була обрана як базова в нашій реалізації.

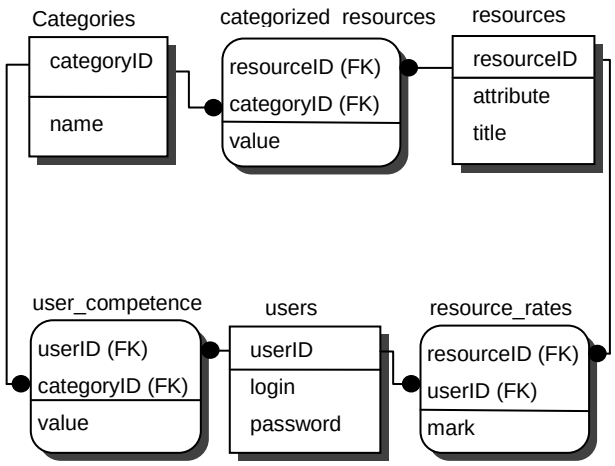


Рис.1. ER-модель частини БД, яка зберігає необхідні дані для проведення оцінювань

На рисунку 1 представлена ER-модель частини БД, яка зберігає дані для проведення оцінювань. Оцінку результатів діяльності віртуальної спільноти порталу система проводить за трьома основними сутностями: користувач (*users*), ресурс (*resources*), розділ (*Categories*). Таблиця *user_competence* зберігає дані про авторитет користувача в певній категорії, *categorized_resources* – цінність, яку мають ресурси в певних розділах, *resource_rates* – дані про оцінювання користувачами ресурсів.

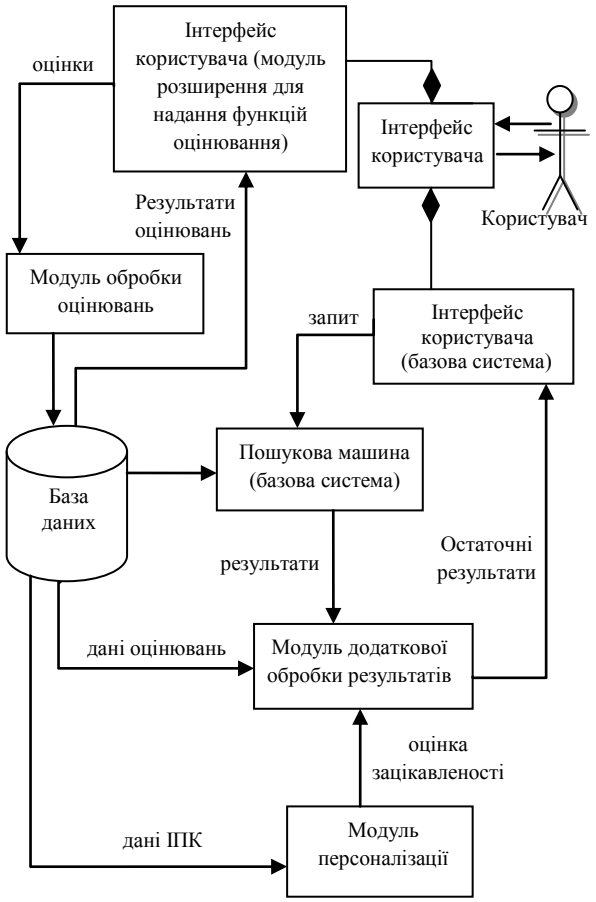


Рис.2. Загальна схема функціонування системи

На рисунку 2 представлена загальна схема функціонування системи. Інтерфейс користувача був розширений модулем обробки дій користувача щодо оцінювання ресурсів. Для здійснення початкового пошуку визначення релевантості певного ресурсу запиту система використовує функціональні можливості базової пошукової системи з подальшою їх зміною на основі алгоритмів персоналізації та врахування результатів діяльності віртуальних співтовариств, описаних вище.

Висновки

У роботі описано розв'язання актуальної наукової задачі розробки основних принципів функціонування та впровадження системи персоналізованого пошуку, яка дозволяла б здійснювати пошук документів тематичного порталу з урахуванням результатів кооперативної діяльності віртуального співтовариства порталу по оцінці документів. Детально представлені математичні моделі, на основі яких функціонує розроблена система, охарактеризовані основні аспекти її роботи, представлена архітектура.

Можна сформулювати основні подальші напрямки досліджень та розвитку та удосконалення системи. Актуальною задачею подальших досліджень при збереженні основних засад роботи може бути удосконалення математичних моделей, що лежать в основі функціонування системи.

Список використаних джерел

1. *Глибовець М. М.* Веб сервіси оброблення документів / Глибовець М. М., Жигмановський А. А. Заболотний Р. І., Захоженко П. О. – Київ: Національний університет "Києво-Могилянська академія". 2012. – 212 с.
2. *Глибовец Н. Н.* Создание динамической системы распространения контента с использованием протокола BitTorrent / Глибовец Н. Н., Мельник В. Е., Сидоренко М. О. // Компьютерная математика. – 2012. – №2. – С. 76-85.

References

1. GLIBOVEC M. M., ZHIGMANOVS'KIJ A. A., ZABOLOTNIJ R. I. and ZAHOZHENKO P. O. (2012) *Veb servisi obroblennja dokumentiv.* Kyiv: Nacional'nij universitet "Kievo-Mogiljans'ka akademija".
2. GLIBOVEC N. N., MEL'NIK B. E. and SIDORENKO M. O. (2012) *Sozdanie dinamicheskoj sistemy rasprostranenija kontenta s ispol'zovaniem protokola BitTorrent.* Komp'juternaja matematika. 2.p. 76-85.

3. *Глибовець М. М.* Алгоритм та онлайн-застосування пошуку осередків зацікавленості за обраною предметною областю / Глибовець М. М., Сидоренко М. О. // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: фізико-математичні науки. – 2012. – № 3. – С. 133-140.
4. *Ландэ Д. В.* Поиск знаний в Internet. Профессиональная работа / Ландэ Д. В. – Москва: Вильямс, 2005. – 272 с.
5. *SearchWiki* — персонализированный поиск от *Google*– 2008. – Режим доступу: http://internetno.net/category/anonsi/searchwiki/
6. *Широков А.В.* Разработка модели информационного портрета пользователя для персонифицированного поиска. – Режим доступу: http://*page-adviser.ru/papers/pdf/shirokov.pdf*
7. *Qiu F., Cho J.* Automatic identification of user interest for personalized search. / Qiu F., Cho J. //: WWW *'06*: Proceedings of the 15th international conference on World Wide Web, 22 – 26 May 2006, New York, USA : ACM Press. – New York. – 2006. – P.727-736
8. *Trajkova J.* Improving Ontology-Based User Profiles / J. Trajkova, S. Gauch – Режим доступу: http://eolo.cps.unizar.es/docencia/MasterUPV/Articulos/Improving%20Ontology-Based%20User%20Profiles.pdf
9. Режим доступу: http://www.phpdig.net/

3. GLIBOVEC M. M. and SIDORENKO M. O. (2012) Algoritm ta onlajn-zastosuvannja poshuku oseredkiv zacikavlenosti za obranoju predmetnoju oblastju. *Visnyk Kyivskoho natsionalnoho universitetu imeni Tarasa Scevchenka. Seriya fizyko-matematychni nauky*. 3. p. 133-140.
4. LANDJE D. V. (2005) *Poisk znanij v Internet. Professional'naja rabota*. Moskva: Vil'jams. Internetno (2008)
5. *SearchWiki* — personalized search from *Google* – Available from: http://internetno.net/category/anonsi/searchwiki/
6. SHIROKOV A.V. *Razrabotka modeli informacionnogo portreta pol'zovatelja dlja personificirovannogo poiska.* – Available from: http://*page-adviser.ru/papers/pdf/shirokov.pdf*
7. QIU, F. and CHO J. (2006) Automatic identification of user interest for personalized search. In *WWW '*06*: Proceedings of the 15th international conference on World Wide Web*, Monday 22nd to Friday 26th May 2006. New York: ACM Press. pp.727-736
8. TRAJKOVA, J. and GAUCH, S. Improving Ontology-Based User Profiles. – Available from: http://eolo.cps.unizar.es/docencia/MasterUPV/Articulos/Improving%20Ontology-Based%20User%20Profiles.pdf
9. Available from: http://www.phpdig.net/

Надійшла до редколегії 29.04.14

УДК 519.87

Назаренко О. М.[1], к. ф.- м. н., доц.,
Карпуша М. В.[2], аспірант.

Дискретно-неперервні моделі в багатокритеріальних задачах оптимізації з лінійним і квадратичним критеріями якості

[1]Сумський державний університет, 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова 2.
[2] Сумський державний університет, 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова 2,
e-mail: m.karpusha@mss.sumdu.edu.ua.

O. M. Nazarenko[1], Ph.D. (Physics&Mathematics), Associate Professor,
M. V. Karpusha[2], Postgraduate Student.

Discrete-continuous Model in Multicriteria Optimization Problem with Linear and Quadratic Quality Criterias

[1]Sumy State University, 40007, Sumy, Rymskogo-Korsakova str., 2.
[2]Sumy State University, 40007, Sumy, Rymskogo-Korsakova str., 2,
e-mail: m.karpusha@mss.sumdu.edu.ua.

У даній роботі розглянуті дискретно-неперервні моделі з тризначними дискретними змінними, які можуть бути використані при параметричній ідентифікації задачі багатокритеріальної оптимізації з лінійним і квадратичним критеріями якості в умовах статистичної невизначеності. Апробація запропонованих моделей проводилася на основі реальних статистичних даних фінансових систем.

Ключові слова: параметрична ідентифікація, дискретно-неперервна модель, статистична невизначеність.

This paper discusses the use of discrete-continuous models with discrete variables for multicriteria optimization problems with linear and quadratic quality criterias under statistical uncertainty. The models have the following features: consider preliminary data analysis for stationary and nonstationary; investigate continuous and discrete effects presence in these time series; these models use multiple logit- and probit-model to determine the most probable option for changes of time series that allows to determine high predictive properties; iterative procedure allows to fulfill all prerequisites of the method of least squares estimation for unknown parameters and allows to get high simulation properties; envisage the procedure of verification that mathematical model describes the investigated time series in the best way. Testing of the proposed discrete-continuous models was conducted based on actual statistics of financial systems. Parametric identification of the portfolio optimization problem was considered. High imitation and forecasting properties of the obtained models point to possibility of using the results during modeling real systems.

Key words: identification, discrete-continuous model, statistical uncertainty.

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Буй Д. Б.

Вступ. Задачі багатокритеріальної оптимізації зустрічаються в різних сферах науки, техніки та економіки, де застосовуються критерії з суперечливими цілями. При цьому на практиці найбільш розповсюдженими є лінійні та квадратичні критерії. Вони дозволяють адекватно описувати досліджувані процеси при досить вивченому та простому алгоритмі розв'язання таких задач. Тому для підвищення ефективності отриманих розв'язків актуальним є використання адекватних методів параметричної ідентифікації невідомих параметрів цих моделей. Проблема такої ідентифікації виникає для задач, що описують досить складні процеси. У випадку великої розмірності ускладнення самої математичної моделі веде до труднощів при знаходженні чисельного розв'язку. Тому актуальним є розвиток методів, які б описували складні системи досить простими моделями і враховували особливості даної системи, яка функціонує в умовах невизначеності, в процесі параметричної ідентифікації.

У даній роботі моделювання і ідентифікацію невідомих параметрів оптимізаційних задач

© О. М. Назаренко, М. В. Карпуша, 2014

пропонується проводити за допомогою дискретно-неперервних моделей. Цей підхід був використаний для параметричної ідентифікації та прогнозування часових рядів [5]. Дані моделі мають наступні переваги: ураховують попередній аналіз даних на стаціонарність чи нестаціонарність; досліджують наявність у даних часових рядах ефектів двох типів: неперервних та дискретних; при прогнозуванні даних моделей використовуються множинні логіт- та пробіт-моделі, що дозволяють отримати високі прогнозні властивості; ітераційна процедура дозволяє виконати всі передумови використання методу найменших квадратів для оцінки невідомих параметрів даної моделі та отримати високі імітаційні властивості; передбачають процедуру верифікації, що дозволяє отримати математичну модель, яка найкращим чином описує досліджувані часові ряди. Отримані високоточні інтервальні прогнозні значення використовуються при постановці багатокритеріальної задачі оптимізації [6].

Постановка задачі. Нехай деяка система характеризується вектором-стовпцем фазових координат $\mathbf{x} \in R^n$. Розглянемо квадратичну $f_1(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'\mathbf{Q}\mathbf{x}$ та лінійну $f_2(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'\mathbf{c}$ функції якості, що відображають стани даної системи і суттєво залежать від фазових координат. Задачу багатокритеріальної оптимізації запишемо в наступному вигляді:

$$\begin{cases} \{ f_1(\mathbf{x}),\ f_2(\mathbf{x}) \} \to \min, \\ \mathbf{x} \in \Omega. \end{cases} \qquad (1)$$

Тут Ω – допустима множина, яка входить в область визначення $\mathrm{D}_1(f_1) \subset R^n$, $\mathrm{D}_2(f_2) \subset R^n$. Її будемо задавати наступним чином:

$$\Omega = \{ \mathbf{x} \in R^n :\ g_i(x) \le 0,\ i = 1, 2, ..., m. \}. \qquad (2)$$

Після ідентифікації параметрів $\mathbf{c}$, $\mathbf{Q}$ та системи обмежень (2) наступним етапом є визначення множини оптимальних за Парето розв'язків або деякої точки з цієї множини.

Для розв'язання задачі (1) найбільш розповсюдженими є методи скаляризації, які полягають у зведені вектору цільових функцій багатокритеріальної задачі в одну скалярну функцію. Розглянемо два з них: метод зважених сум та метод ε-обмежень. За допомогою першого методу шляхом побудови зважених сум можна отримати наступну задачу квадратичного програмування:

$$\begin{cases} f_2(\mathbf{x}) + \lambda\ f_1(\mathbf{x}) \to \min, \\ \mathbf{x} \in \Omega. \end{cases} \qquad (3)$$

Метод ε-обмежень мінімізує одну з цільових функцій, а інші цільові функції перетворюються в обмеження. Тоді задачу (1) можна сформулювати у вигляді:

$$\begin{cases} f_1(\mathbf{x}) \to \min, \\ f_2(\mathbf{x}) \le \varepsilon_1, \\ \mathbf{x} \in \Omega, \end{cases} \qquad (4)$$

або

$$\begin{cases} f_2(\mathbf{x}) \to \min, \\ f_1(\mathbf{x}) \le \varepsilon_2, \\ \mathbf{x} \in \Omega. \end{cases} \qquad (5)$$

Якщо в задачах (3), (4) та (5) параметри $\mathbf{c}$ і $\mathbf{Q}$ є визначеними з якихось міркувань, то при розв'язанні цих задач не виникає труднощів. Але, якщо складність системи не дозволяє встановити точні значення $\mathbf{c}$ і $\mathbf{Q}$, то актуальним стає розвиток методів, які б адекватно оцінювали невідомі параметри, враховуючи невизначеність. Зазначимо, що повністю врахувати фактор невизначеності неможливо.

Класичним методом визначення параметрів $\mathbf{c}$ і $\mathbf{Q}$ є використання усереднених значень на основі статистичної інформації минулого. Недоліком такого підходу є чутливість цих параметрів до незначних змін статистичної інформації. Це може приводити до неадекватних результатів при розв'язанні задачі (1). В роботах Беста М., Грауера Р., Чопра В., Зіемба В., Каллберга Ж. показано, що неправильна ідентифікація компонент вектора $\mathbf{c}$ набагато більше впливає на стійкість оптимального рішення $\mathbf{x}^*$ ніж неправильна ідентифікація елементів матриці $\mathbf{Q}$ [4]. Більш точні оцінки вектора $\mathbf{c}$ можна отримати за допомогою дискретно-неперервних моделей. У [6] проведений порівняльний аналіз застосування точкових прогнозів в задачі оптимізації (1) методами усереднення та прогнозування за допомогою дискретно-неперервних моделей. Однак у такій постановці задача (1) розв'язується як класична задача оптимізації з детермінованими входами, і при такому підході ігнорується невизначеність на етапі оптимізації. Тому актуальним є врахування невизначеності параметра $\mathbf{c}$ в самій оптимізаційній задачі.

Найбільш простий спосіб полягає у побудові довірчих інтервалів компонент вектора $\mathbf{c}$. Припустимо, що різниця між прогнозним $\hat{c}_i$ і реальним c_i значеннями не перевищує δ_i $(i = 1, \ldots, n)$. Тоді множину невизначеності можна задати у вигляді:

$$U(\hat{\mathbf{c}}, \boldsymbol{\delta}) = \{\mathbf{c}, |c_i - \hat{c}_i| \le \delta_i, i = 1, \ldots, n\}.$$

Задачу (1) сформулюємо у вигляді:

$$\begin{cases} \mathbf{c}'\mathbf{x} - \boldsymbol{\delta}'|\mathbf{x}| - \lambda \mathbf{x}'\mathbf{Q}\mathbf{x} \to \max, \\ \sum_{i=1}^{n} x_i = 1. \end{cases} \quad (6)$$

Тут використання модуля можна пояснити наступним чином. Якщо величина x_i буде додатною, то найгіршим можливим значенням з усіх значень прогнозного інтервалу буде $\hat{c}_i - \delta_i$. Якщо ж x_i від'ємна, то найгіршим варіантом буде значення $\hat{c}_i + \delta_i$. Тоді задача оптимізації (6) полягає в мінімізації найгірших випадків. При такій постановці чим ширші довірчі інтервали, тим менше значення x_i, а при зменшенні δ_i значення x_i збільшується (у порівнянні з класичним розв'язком) [1].

Використовуючи статистичну інформацію на історичному періоді за допомогою дискретно-неперервних моделей можна знайти множину $U(\hat{\mathbf{c}}, \boldsymbol{\delta})$. Отримані інтервальні прогнозні значення використовуються для параметричної ідентифікації задачі (6).

Дискретно-неперервна модель з тризначною дискретною змінною. Припустимо, що існує часовий ряд спостережень $\{c_t,\ t = 1, 2, \ldots, N\}$ на проміжку $t \in [1, N]$ (період ідентифікації). Першим етапом є встановлення стаціонарності чи нестаціонарності відповідного часового ряду. У випадку нестаціонарності використовуються методи зведення до стаціонарного типу [3].

Після зведення даного часового ряду до стаціонарного наступним етапом є побудова регресійної моделі

$$r_t = f(t, \mathbf{a}) + \mathbf{d}'\mathbf{z} + \varepsilon_t, \quad (7)$$

де r_t – значення ряду в момент часу t, $f(t, \mathbf{a})$ – неперервна складова, $\mathbf{d}'\mathbf{z}$ – дискретна складова, $\mathbf{a} = (a_0, a_1, ..., a_l)'$, $\mathbf{d} = (d_0, d_1, ..., d_m)'$ – вектори оцінювальних параметрів, $\mathbf{z} = (z_{1t}, z_{2t}, ..., z_{mt})'$ – вектор змінних дискретної складової; ε_t – випадкове збурення.

У якості неперервної складової розглядаються авторегресійні моделі, а при наявності у часовому ряді змінного математичного сподівання до неперервної частини включається тренд.

Дискретна складова визначається ітераційним шляхом. Після оцінювання неперервної частини регресійної моделі (7) і обчислення залишків $\varepsilon_t^{(1)} = r_t - f(t, \hat{\mathbf{a}})$ на першому кроці дискретна змінна формується наступним чином:

$$z_{1t} = \begin{cases} +T^{(1)}, \varepsilon_t^{(1)} > \xi^{(1)}, \\ 0, -\xi^{(1)} \le \varepsilon_t^{(1)} \le \xi^{(1)}, \\ -S^{(1)}, \varepsilon_t^{(1)} < -\xi^{(1)}. \end{cases} \quad (8)$$

Тут $\xi^{(1)}$ – точність наближення, $S^{(1)}$ і $T^{(1)}$ – кількість точок з даного проміжку, в яких виконуються нерівності $\varepsilon_t^{(1)} > \xi^{(1)}$ і $\varepsilon_t^{(1)} < -\xi^{(1)}$ відповідно (тоді середнє значення фіктивної змінної автоматично дорівнює нулю). Далі оцінюється регресійна модель $\varepsilon_t^{(1)} = d_1 z_{1t} + \varepsilon_t^{(2)}$. На k-кроці ($k = 2, 3, \ldots, m$) обчислюються залишки $\varepsilon_t^{(k)} = \varepsilon_t^{(k-1)} - \hat{d}_{(k-1)} z_{(k-1)t}$, нова фіктивна змінна дорівнює

$$z_{kt} = \begin{cases} +T^{(k)}, \varepsilon_t^{(k)} > \xi^{(k)}, \\ 0, -\xi^{(k)} \le \varepsilon_t^{(k)} \le \xi^{(k)}, \\ -S^{(k)}, \varepsilon_t^{(k)} < -\xi^{(k)}, \end{cases} \quad (9)$$

і регресійна модель має вигляд $\varepsilon_t^{(k)} = d_k z_{kt} + \varepsilon_t^{(k+1)}$.

Практичні дослідження показують, що для досягнення високого значення коефіцієнта детермінації R^2 регресійної моделі (7) достатньо 2-3 ітерації. Значення точності $\xi^{(k)}$, $k = 1, 2, \ldots, m$ на кожному кроці ітерації обирається таким чином, щоб забезпечити нечутливість оціненої регресійної моделі до незначних змін вхідної інформації [5]. Неоднозначності при визначенні прогнозного значення регресанта (для прогнозної точки $t^* = N + 1$ існує $3m$ значень регресанта) усуваються за допомогою множинних логіт- або пробіт- моделей.

Задача оптимізації інвестиційного портфеля. Задача багатокритеріальної оптимізації з лінійним та квадратичним критеріями була розглянута Марковіцем Г. в контексті оптимізації інвестиційного портфеля [2]. Такий підхід отримав велике розповсюдження на практиці, так як є досить простим та змістовним при використанні. Але недоліком підходу Марковіца було те, що він не враховував невизначеність параметрів в своїй моделі і тим самим використання його моделі на практиці може приводити до неадекватних результатів. Тому актуальним залишається розвиток цієї задачі.

Нехай інвестиційний портфель може складатися з n активів, x_i – доля капіталу, вкладеного в i-й актив. Тоді $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)'$ – вектор, що визначає структуру портфеля, при чому $\sum_{i=1}^{n} x_i = 1$. Будемо вважати, що на періоді $[1, N]$ відома статистична інформація про динаміку доходностей кожного з n активів $\{r_{it}, i = 1, 2, ..., n\}$. При математичному моделюванні таких систем використовують статистичну інформацію доходностей, а не цін, так як ці величини є обезрозмірених. В момент часу $t^* = N + 1$ доходність портфеля є випадковою величиною

$$R = \sum_{i=1}^{n} x_i r_{i(N+1)}, \qquad (10)$$

з математичним сподіванням $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{x}'\mathbf{c}$ та дисперсією $\sigma^2 = \mathbf{x}'\mathbf{Q}\mathbf{x}$. Тут $r_{i(N+1)}, i = 1, 2, ..., n$ - доходність кожного з активів за інтервал часу $[N, N+1]$, $\mathbf{c}$ та $\mathbf{Q}$ - математичне сподівання та матриця коваріації вектору $\mathbf{r}_{N+1} = (r_{1(N+1)}, r_{2(N+1)}..., r_{n(N+1)})'$.

Задача статичної оптимізації портфеля полягає в тому, щоб мінімізувати ризик та максимізувати доходність. Позначивши, $f_1(\mathbf{x}) = -\mathbf{x}'\mathbf{c}$ та $f_2(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'\mathbf{Q}\mathbf{x}$ задачу оптимізації інвестиційного портфеля можна записати у вигляді (1), (3), (4) та (5). Крім обмеження $\sum_{i=1}^{n} x_i = 1$ на практиці також можуть додаватися додаткові обмеження на вектор $\mathbf{x}$. Якщо дозволена операція короткого продажу, на компоненти вектора $\mathbf{x}$ накладаються обмеження $-1 \le x_i \le 1, i = 1, 2, ..., n$. Короткий продаж – операція продажу цінного паперу, що інвестор запозичує у брокера. Згодом інвестор повертає борг, купуючи такий же цінній папір на торгах. Якщо заборонені операції короткого продажу, то в модель додається обмеження $0 \le x_i \le 1$, $i = 1, 2, ..., n$.

В класичній задачі оптимізації інвестиційного портфеля параметр $\mathbf{c}$ обирається як математичне сподівання доходностей активів, а $\mathbf{Q}$ – як матриця коваріації на періоді $[1, N]$.

Як зазначено вище, у даній роботі у якості параметра $\mathbf{c}$ пропонується використовувати прогнозне значення доходностей активів, отриманих за допомогою дискретно-неперервних моделей. При цьому параметр $\mathbf{Q}$ ідентифікується як і в класичному підході.

Розглянемо портфель, що може складатися з наступних акцій українських компаній: Kernel Holding S.A. (KER), Astarta Holding N.V. (AST), Coal Energy S.A. (CLE), Milkiland N.V. (MLK), Agroton Public Limited (AGT), KSG Agro S.A. (KSG), Industrial Milk Company S.A. (IMC), Sadovaya Group S.A. (SGR), Ovostar Union N.V. (OVO), Westa ISIC S.A. (WES) (в дужках вказано котирування цих акцій на Варшавській фондовій біржі). Використана статистична інформація цін (p_t) та доходностей ($r_t = \Delta p_t / p_{t-1}$, $\Delta p_t = p_t - p_{t-1}$) акцій за період з 03.10.2011 г. по 17.02.2012 г.

У [3, 4] розглянуто детально процес побудови дискретно-неперервних моделей. Причому в [4] показано, що використання точкових прогнозів, знайдених за допомогою дискретно-неперервних моделей, дозволяє удосконалити процес прийняття інвестиційного рішення. Розглянемо, як зміниться розв'язок задачі при використанні інтервальних прогнозів.

Розв'яжемо оптимізаційні задачі (3) та (6) для різних значень параметра λ від 2 до 100. На рис. 1 приведені структури оптимальних рішень в залежності від методу ідентифікації вектору $\mathbf{c}$. Тут в залежності від конкретного параметру λ показано відповідну структуру оптимального портфеля (одним відтінком сірого відкладається значення, яке відповідає відповідному розв'язку x_i^*, $i = \{1, 2, ..., n\}$). На рис. 1 зображені випадки, коли для параметричної ідентифікації вектора $\mathbf{c}$ використані його усереднені значення, точкові та інтервальні прогнози дискретно-неперервних моделей та реальні значення $\mathbf{r}_{N+1}$.

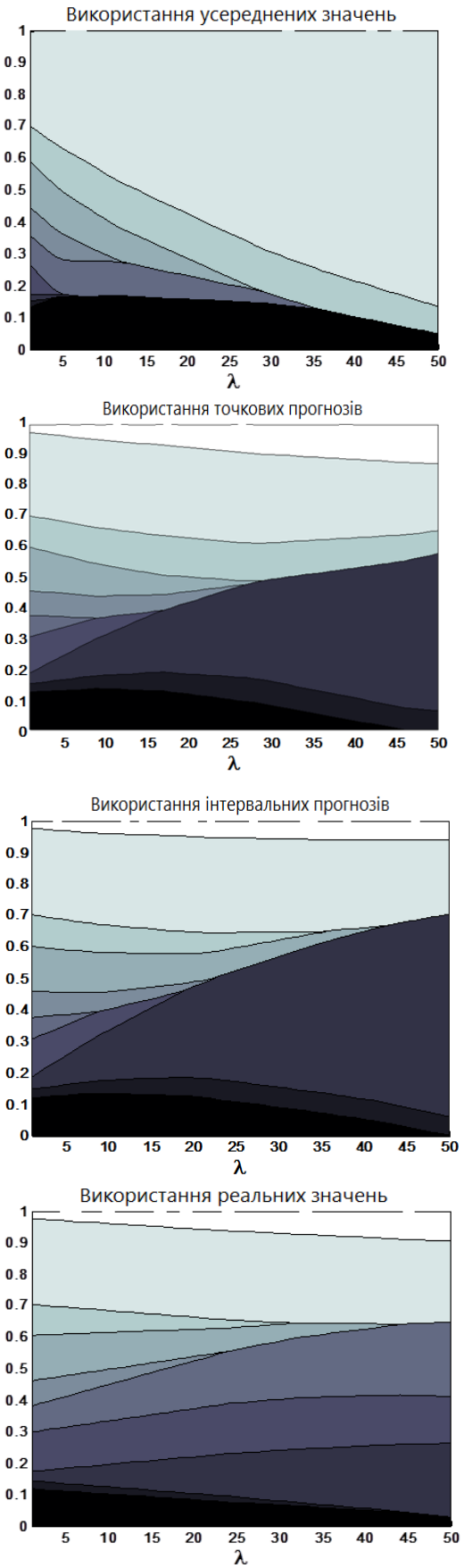


Рис. 1. Оптимальні розв'язки задач оптимізації портфеля

Проаналізуємо отримані результати. При розв'язанні задачі оптимізації портфеля (3) класичним методом отримали наступний результат: якщо деякий актив має великий рівень очікуваних доходів та низький рівень стандартного відхилення, то його доля в оптимальному портфелі буде високою, в той же час для портфелів з низьким доходом та високим відхиленням ця доля буде низькою. Хоча цей результат є досить логічним, але він суперечить основній ідеї портфельного інвестування – зменшення ризиків за допомогою розподілення всіх своїх коштів серед багатьох активів, що корелюють між собою (ідея диверсифікації портфеля). Тобто основна доля інвестицій буде інвестована в незначну кількість акцій, а не розподілена між ними більш менш рівномірно. Також в такому портфелі присутні акції, доля яких незначна. Включення таких активів для інвестора є невиправданим, так як їх дохід може не покривати його витрати на включення цієї акції в портфель. При цьому портфелі, які відповідають випадку, коли вектор **c** ідентифікований запропонованими моделями, мають більш рівномірну структуру та більш відповідають реальній ситуацій.

Рис. 1 демонструє різницю в оптимальних розв'язках при різних значеннях параметра **c**. При чому ця різниця збільшується при збільшенні ризикованості інвестиційної політики, тобто при збільшені значення λ.

Аналогічний аналіз був проведений при включені різного типу обмежень до оптимізаційної задачі. Уточнення обмежень дозволяє покращити результати розв'язанні задачі в класичному випадку, але якщо обмеження накладаються досить жорстко, то вони повністю визначають структуру портфеля і тим самим відпадає необхідність використання відповідної оптимізаційної задачі.

Як видно, використання інтервальних прогнозів якісно не змінює розв'язок задачі. В контексті оптимізації інвестиційного портфеля інвестор розглядає не єдиний можливий інтервал, а деяку множину можливих сценаріїв розвитку дійсності. Зазначимо, що для знаходження довірчого інтервалу можна використовувати метод реструктуризації портфеля [2]. Він полягає в тому, що методом Монте-Карло точкова оцінка з деяких міркувань перетворюється в множину ймовірних сценаріїв. Але такий підхід вимагає досить великих розрахунків для портфелів великої розмірності.

Отже, використовуючи запропоновані моделі можна отримати добре диверсифікований портфель. Реальний дохід інвестора, який шукає найменш ризиковий портфель різними методиками, буде наступним. Якщо інвестор буде використовувати методику усереднення, його власний капітал збільшиться на 1,15%, використовуючи точкові прогнози – на 1,34%, використовуючи інтервальні прогнози – на 1,38%. Хоча різниця між доходностями не є суттєвою, проте вона буде збільшуватися при збільшені рівня ризику.

Висновки. В даній роботі розглянуто використання дискретно-неперервних моделей для ідентифікації задачі оптимізації в умовах невизначеності. Дані моделі мають наступні переваги: враховують попередній аналіз даних на стаціонарність чи нестаціонарність; використовують множинні логіт- та пробіт-моделі при прогнозуванні, що дозволяє визначити найбільш ймовірний варіант прогнозу та отримати високі прогнозні властивості; досліджують наявність у даних часових рядах ефектів двох типів: неперервних та дискретних; використовують ітераційну процедуру, що дозволяє виконати всі передумови використання методу найменших квадратів для оцінки невідомих параметрів даної моделі та отримати високі імітаційні та прогнозні властивості; використовують процедуру верифікації, що дозволяє отримати математичну модель, яка найкращим чином описує досліджувані часові ряди. Дані моделі застосовувалися для параметричної ідентифікації задач оптимізації портфеля і дали значно кращі результати у порівнянні з класичними моделями.

Список використаних джерел

1. *Ben-Tal A.* Robust Optimization / A. Ben-Tal, L. Ghaoui, A. Nemirovski – Princeton University Press, 2009. – 542 p.
2. *Fabozzi F*. Robust Portfolio Optimization and Management / F. Fabozzi, P. Kolm, D. Pachamanova, S. Focardi. – N. Y.: John Wiley & Sons, 2007. – 495 p.
3. *Patterson K.* An Introduction to Applied Econometrics: A Time Series Approach. – Palgrave, 2000. – 797 p.
4. *Chopra V.* The Effect of Errors in Means, Variances, and Covariances on Optimal Portfolio Choice / V. Chopra, W. Ziemba// Journal of Portfolio Choice. – 1993. – № 2 (19). – P. 6 – 11.
5. *Назаренко О. М.* Моделювання та прогнозування нестаціонарних часових рядів / О. М. Назаренко, М. В. Карпуша// Вісник Національного технічного університету «ХПІ». – 2012. – №2. – С. 162 – 72.
6. *Назаренко О. М.* Ідентифікація параметрів задачі багатокритеріальної оптимізації інвестиційного портфеля / О. М. Назаренко, М. В. Карпуша // Вісник Харківського національного університету. Серія «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління». – 2012. – №1037. – С. 82 – 91.

References

1. BEN-TAL, A., GHAOUI, L., and NEMIROVSKI, A. (2009) *Robust Optimization.* Princeton University Press.
2. FABOZZI, F.et al. (2007) *Robust Portfolio Optimization and Management*. N. Y.: John Wiley & Sons.
3. PATTERSON, K. (2000) *An Introduction to Applied Econometrics: A Time Series Approach.* Palgrave.
4. CHOPRA, V., ZIEMBA, W. (1993) The Effect of Errors in Means, Variances, and Covariances on Optimal Portfolio Choice. *Journal of Portfolio Choice.* 2 (19). p. 6-11.
5. NAZARENKO, O.M., KARPUSHA, M.V. (2012) Modeling and Forecasting Nonstationary Time Series. *Bulletin of National Technical University "KhPI".* 2. p. 162-172.
6. NAZARENKO, O.M., KARPUSHA, M.V. (2012) Identification of the Parameters of the Problem Multiobjective Optimization Portfolio. *Bulletin of Kharkiv National University. Series "Mathematical Modeling. Information Technology. Automated Control Systems".* 1037. p. 82-91.

Надійшла до редколегії 25.08.2014.

УДК 004.42,510.649

Нікітченко М.С. [1], д. ф.-м. н., проф.,
Криволап А.В. [2], аспірант.

Композиція побудови умови за прообразом у монотонних логіках Флойда-Хоара

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка,03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: nikitchenko@unicyb.kiev.ua
[2] Київський національний університет імені Тараса Шевченка,03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: krivolapa@gmail.com

M. S. Nikitchenko[1], Doctor of Sciences (Phys.-Math.), Professor,
A. V. Kryvolap[2], PhD student.

Composition of preimage condition construction in monotone Floyd-Hoare logics

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: nikitchenko@unicyb.kiev.ua
[2] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: krivolapa@gmail.com

В роботі розглядаються програмні логіки з монотонною композицією Флойда-Хоара. Дається визначення перетворювача предикатів – композиції побудови умови за прообразом для випадку зазначених вище програмних логік з частковими предикатами.

Розглянуто основні композиції програмного рівня за винятком циклічної композиції. Для цих композицій подано формули, що дозволяють обчислити умову за прообразом за допомогою синтаксичних перетворень. Доведено, що отримані таким чином предикати будуть дійсно задовольняти визначенню композиції побудови умови за прообразом.

Показано як використовуючи відповідні перетворювачі предикатів, можна звести проблему пошуку спростування трійки Флойда-Хоара в програмній логіці до пошуку спростування формули предикатної логіки.

Ключові слова: програмні логіки, перетворювачі предикатів, спростовність.

Program logics with monotone Floyd-Hoare composition are considered in this work. This logic is an extension of the Floyd-Hoare logic on partial predicates. A predicate transformer – preimage condition construction – is defined for the case of abovementioned program logics with partial predicates. Such predicate transformer can be treated as a substitution for Dijkstra's weakest precondition predicate transformer for tne extension of the Floyd-Hoare logic on partial predicates.

Main compositions of program level such as assignment composition, conditional composition, sequential execution composition are being studied. For those compositions formulas that permit calculate preimage condition by implementing series of syntactic transformations are presented. It was proven that predicates obtained in this way will satisfy composition of preimage condition construction definition.

It is shown how using corresponding predicate transformers the refutability problem for Floyd-Hoare assertion in program logics can be reduced to the same problem for formula in predicate logic.

Key Words: program logics, predicate transformers, refutability.

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Буй Д.Б.

Монотонна логіка Флойда-Хоара для часткових квазіарних предикатів

У статті [1] показано, що класична логіка Флойда-Хоара не є монотонною, якщо її розширити на випадок часткових квазіарних предикатів. Тому було дано визначення композиції Флойда-Хоара, яка була б монотонною за всіма аргументами. Монотонність розуміється відносно визначеності

© М.С. Нікітченко, А.В. Криволап, 2014

предикатів та функції. Інтуїтивне визначення наступне: композиція є монотонною, якщо при довизначенні предикатів та функцій, що є її аргументами, результат не зміниться на тих даних, на яких він вже був визначений.

Всі поняття, що не визначені в даній роботі, будемо розглядати в смислі [1–3]. Зокрема, V – множина імен (змінних), A – множина базових значень, ${}^{V}A$ – множина номінативних даних, $Pr^{V,A} : {}^{V}A \to \{T,F\}$ – множина квазіарних предикатів над ${}^{V}A$, $Fn^{V,A} : {}^{V}A \to A$ – множина квазіарних ординарних функцій над ${}^{V}A$, що задають семантику виразів в програмі, $FPrg^{V,A} : {}^{V}A \to {}^{V}A$ – множина біквазіарних функцій над ${}^{V}A$, які є одним з варіантів подання семантики програм. Зважаючи на приведені визначення, композиція Флойда-Хоара буде мати тип

$$FH : Pr^{V,A} \times FPrg^{V,A} \times Pr^{V,A} \to Pr^{V,A},$$

тобто за передумовою, програмою та післяумовою вона видає відповідний предикат.

Перед тим, як дати означення композиції Флойда-Хоара, наведемо додаткові визначення та позначення:

- $\mu(d)\downarrow$ будемо позначати, що μ визначено на d;
- $\mu(d)\downarrow = d'$ будемо позначати, що μ визначено на d і має значення d';
- $\mu(d)\uparrow$ будемо позначати, що μ невизначено на d;
- $\mu[S] = \{\mu(d) \mid \mu(d)\downarrow, d \in S\}$ будемо позначати образ S відносно μ;
- $\mu^{-1}[S'] = \{d \mid \mu(d)\downarrow, \mu(d) \in S'\}$ будемо позначати прообраз (обернений образ) S' відносно μ.

Тоді можна дати визначення областей істинності, хибності та невизначеності предиката $p \in Pr^{V,A}$:

$$p^T = \{d \mid p(d) = T\},$$
$$p^F = \{d \mid p(d) = F\},$$
$$p^{\perp} = \{d \mid p(d)\uparrow\}.$$

Додатково можна навести визначення образів та прообразів відповідних областей ($p, q \in Pr^{V,A}$, $pr \in FPrg^{V,A}$):

$$q^{-T,pr} = pr^{-1}[q^T],$$
$$q^{-F,pr} = pr^{-1}[q^F],$$
$$q^{-\perp,pr} = pr^{-1}[q^{\perp}],$$
$$p^{T,pr} = pr[p^T],$$
$$p^{F,pr} = pr[p^F],$$
$$p^{\perp,pr} = pr[p^{\perp}].$$

Композиція Флойда-Хоара визначена наступним чином:

$$FH(p,pr,q)(d) = \begin{cases} T, \text{ якщо } p(d)\downarrow = F \\ \quad \text{або } q(pr(d))\downarrow = T, \\ F, \text{ якщо } p(d)\downarrow = T \\ \quad \text{та } q(pr(d))\downarrow = F, \\ \text{невизначено в інших випадках.} \end{cases}$$

Таким чином області істинності та хибності визначеної композиції рівні відповідно:

$$FH(p,pr,q)^T = p^F \cup q^{-T,pr},$$
$$FH(p,pr,q)^F = p^T \cap q^{-F,pr}.$$

В статті [1] було доведено, що така композиція буде не лише монотонною, але й неперервною. Монотонність можна записати, як:

$$p \subseteq p', pr \subseteq pr', q \subseteq q' \Rightarrow$$
$$\Rightarrow FH(p,pr,q) \subseteq FH(p',pr',q').$$

Під істинністю предиката будемо як і в статті [1] розуміти неспростовність. Іншими словами це значить, що: $\models p \Leftrightarrow p^F = \varnothing$.

Тому умову істинності предиката отриманого застосуванням композиції Флойда-Хоара, можна записати наступним чином:

$$\models FH(p,pr,q) \Leftrightarrow p^T \cap q^{-F,pr} = \varnothing.$$

Монотонна композиція побудови умови за прообразом

Для того, щоб мати змогу перевіряти чи існує спростування для конкретної трійки Флойда-Хоара, потрібно визначити також композицію побудови умови за прообразом (скорочено – композиція умови за прообразом), яка б за післяумовою та програмою видавала б деяку передумову таку, щоб відповідна трійка була б істинною. Для випадку тотальних предикатів Дейкстрою в [4] було введено перетворення предикатів, яке будує найслабкішу

передумову. Якщо розглядати часткові предикати, то очевидно, що не буде існувати єдиного визначення найслабкішої передумови для заданої програми та передумови. Це спричинено тим, що можна давати різні визначення того факту, що один предикат є слабшим за іншій, тобто що один з предикатів є наслідком іншого. Імплікація є лише одним з прикладів такого визначення. Слід також зазначити, що можливі визначення найслабкішої передумови для часткових предикатів не будуть мати потрібних властивостей, а саме: бути монотонною композицією та дозволяти перевіряти спростовність. Так як для спростування не важливо, чи буде отримана передумова найслабкішою з усіх можливих за певним критерієм, то можна при побудові шуканої передумови відмовитись від даної вимоги і перейти до побудови композиції, яку, як було сказано, будемо називати композицією умови за прообразом. Визначимо відповідну композицію виходячи з того, що вона має бути монотонною; крім того, отримана передумова має бути просто обчислена за післяумовою та програмою, а також має дозволяти показати спростовність трійки Флойда-Хоара. Таку композицію умови за прообразом

$$PC : FPrg^{V,A} \times Pr^{V,A} \to Pr^{V,A}$$

будемо визначати наступним чином:

$$PC(pr,q)(d) = \begin{cases} T, \text{ якщо } q(pr(d))\downarrow = T, \\ F, \text{ якщо } q(pr(d))\downarrow = F, \\ \text{невизначено в інших випадках.} \end{cases}$$

Іншими словами області істинності та хибності умови за прообразом є повними прообразами областей істинності та хибності післяумови відносно програми. Формально це можна записати :

$$PC(pr,q) = p \Leftrightarrow p^T = pr^{-1}[q^T], p^F = pr^{-1}[q^F].$$

Однією з вимог до композиції була монотонність. Другою ж була можливість за умовою за прообразом знаходити спростування відповідних трійок Флойда-Хоара. Це стає можливим тому, що умова за прообразом $PC(pr,q)$ хибна на певному даному тоді і тільки тоді, коли програма pr зупиняється на цьому даному і післяумова q є хибною на стані, отриманому в результаті виконання програми. Якщо ж деяка передумова p буде істиною на такому даному, то таке дане буде спростуванням трійки $\{p\}pr\{q\}$. В інакшому випадку, якщо передумова p буде хибною, або невизначеною на всіх даних, де умова за прообразом $PC(pr,q)$ хибна, то трійка $\{p\}pr\{q\}$ буде істиною, бо не буде мати спростування. Більше детально це буде показано згодом.

Лема 1. Композиція умова за прообразом $PC : FPrg^{V,A} \times Pr^{V,A} \to Pr^{V,A}$ – монотонна за всіма аргументами, іншими словами, виконується наступне:

$$pr \subseteq pr', q \subseteq q' \Rightarrow PC(pr,q) \subseteq PC(pr',q').$$

Доведення. Спочатку доведемо, що виконується монотонність за післяумовою, тобто, що $q \subseteq q' \Rightarrow PC(pr,q) \subseteq PC(pr,q')$. Згідно з визначенням маємо, що $PC(pr,q)^T = pr^{-1}[q^T]$, $PC(pr,q')^T = pr^{-1}[q'^T]$, $PC(pr,q)^F = pr^{-1}[q^F]$ та $PC(pr,q')^F = pr^{-1}[q'^F]$. З того, що $q \subseteq q'$ отримуємо $q^T \subseteq q'^T \wedge q^F \subseteq q'^F$. Повні прообрази відносно програми зберігають включення множин [5], тому маємо, що :

$$PC(pr,q)^T \subseteq PC(pr,q')^T,$$
$$PC(pr,q)^F \subseteq PC(pr,q')^F.$$

Це дає відповідно шукане твердження:

$$PC(pr,q) \subseteq PC(pr,q').$$

Залишається лише довести, що виконується $pr \subseteq pr' \Rightarrow PC(pr,q) \subseteq PC(pr',q)$.

Аналогічно попередньому з визначень маємо $PC(pr,q)^T = pr^{-1}[q^T]$, $PC(pr',q)^T = pr'^{-1}[q^T]$, $PC(pr,q)^F = pr^{-1}[q^F]$ та $PC(pr',q)^F = pr'^{-1}[q^F]$. Зрозуміло, що $pr^{-1}[q^T] \subseteq pr'^{-1}[q^T]$ та $pr^{-1}[q^F] \subseteq pr'^{-1}[q^F]$, бо повний прообраз множини за більш визначеною функцією точно буде включати в себе повний прообраз за менш визначеною.

Отже ми маємо, що $PC(pr,q) \subseteq PC(pr',q)$. Це означає, що композиція монотонна і за програмою, тобто вона монотонна за всіма аргументами.

Покажемо, як за побудовою біквазіарної функції (тобто програми) ми можемо визначити відповідну умову за прообразом. Для цього розглянемо всі композиції програмного рівня [3], окрім композиції циклу, а саме: композицію присвоєння, композицію послідовного

виконання, композицію умовного оператору, та композицію тотожної програми. Композиція циклу не дозволяє обчислити умову за прообразом за допомогою простих синтаксичних перетворень, саме тому до розгляду беруться лише ациклічні програми. Проте це не обмежує область застосування перетворювачів предикатів, так як ми можемо розглядати апроксимації програм, що не містять циклів, а натомість містять деяку кількість послідовних виконань тіла циклу. Проводити такі доведення дозволяє той факт, що композиція Флойда-Хоара є монотонною і ми можемо поступово доводити твердження для все більш визначених апроксимацій. Таким чином для вказаних композицій програмного рівня можна довести наступне.

Теорема 1. Мають місце такі рівності:

$$PC(id,q) = q,$$
$$PC(AS^x(fa),q) = S^x(q,fa),$$
$$PC(f \bullet g,q) = PC(f,PC(g,q)),$$
$$PC(IF(r,f,g),q) = (r \to PC(f,q)) \wedge$$
$$\wedge (\neg r \to PC(g,q)) \wedge (r \to r).$$

Доведення. Перед тим, як почати доведення, наведемо визначення основних композицій програмного рівня та функції накладання.

Функція накладання:

$$d_1 \nabla d_2 = [v \mapsto a \mid v \mapsto a \in_n d_2 \vee$$
$$\vee (v \mapsto a \in_n d_1 \wedge \neg \exists a'(v \mapsto a' \in_n d_2))].$$

Інтуїтивно функцію накладання можна розуміти як функцію, що з двох даних утворює нове дане, що містить всі змінні і їх значення з другої іменної множини, та лише ті змінні з першої, що не містяться в другій. Іншими словами значення змінних з другої іменної множини накладаються на значення з першої.

Композиція тотожна програма:

$$id(d) = d, d \in {}^V A.$$

Композиція присвоєння:

$$AS^x(f)(d) = d \nabla [x \mapsto f(d)],$$

де $f \in Fn^{V,A}$, $d \in {}^V A$.

Композиція послідовного виконання:

$$fs_1 \bullet fs_2(d) = fs_2(fs_1(d)),$$

де $fs_1, fs_2 \in FPrg^{V,A}$, $d \in {}^V A$.

Умовна композиція:

$$IF(p, fs_1, fs_2)(d) = \begin{cases} fs_1(d), \text{ якщо } p(d)\downarrow = T, \\ fs_2(d), \text{ якщо } p(d)\downarrow = F, \\ \text{невизначена інакше.} \end{cases}$$

де $p \in Pr^{V,A}, fs_1, fs_2 \in FPrg^{V,A}$, $d \in {}^V A$.

Покажемо, що у всіх випадках виконується визначення умови за прообразом. Зробимо це через області істинності та хибності відповідних предикатів.

Для рівності $PC(id,q) = q$ все очевидно.

$$PC(id,q)^T = id^{-1}[q^T],\ id^{-1}[q^T] = id[q^T],$$
$$id[q^T] = q^T,\ PC(id,q)^F = id^{-1}[q^F],$$
$$id^{-1}[q^F] = id[q^F],\ id[q^F] = q^F.$$

Таким чином ми маємо, що виконуються наступні рівності:

$$PC(id,q)^T = q^T,\ PC(id,q)^F = q^F.$$

Це значить, що виконується $PC(id,q) = q$.

Розглянемо $PC(AS^x(fa),q) = S^x(q,fa)$.

$$PC(AS^x(fa),q)^T = AS^x(fa)^{-1}[q^T],$$
$$PC(AS^x(fa),q)^F = AS^x(fa)^{-1}[q^F].$$

Потрібно показати, що:

$$AS^x(fa)^{-1}[q^T] = S^x(q,fa)^T,$$
$$AS^x(fa)^{-1}[q^F] = S^x(q,fa)^F.$$

Покажемо це спочатку для області істинності, для області хибності все аналогічно.

$$AS^x(fa)^{-1}[q^T] = \{d \mid AS^x(fa)(d) \in q^T\},$$
$$\{d \mid AS^x(fa)(d) \in q^T\} = \{d \mid q(AS^x(fa)(d)) = T\},$$
$$\{d \mid q(AS^x(fa)(d)) = T\} = \{d \mid q(d\nabla x \mapsto fa(d)) = T\},$$
$$\{d \mid q(d\nabla x \mapsto fa(d)) = T\} = \{d \mid S^x(q,fa)(d) = T\},$$
$$\{d \mid S^x(q,fa)(d) = T\} = S^x(q,fa)^T.$$

Підсумовуючи все отримуємо, що $AS^x(fa)^{-1}[q^T] = S^x(q,fa)^T$. Для області хибності аналогічно. Отже, маємо:

$$PC(AS^x(fa),q) = S^x(q,fa).$$

Для того, щоб $PC(f \bullet g,q) = PC(f,PC(g,q))$ потрібно відповідно:

$$PC(f \bullet g,q)^T = PC(f,PC(g,q))^T,$$
$$PC(f \bullet g,q)^F = PC(f,PC(g,q))^F.$$

Розглянемо лише область істинності, для області хибності все аналогічно.

$$PC(f \bullet g,q)^T = f \bullet g^{-1}[q^T],$$
$$f \bullet g^{-1}[q^T] = f^{-1}[g^{-1}[q^T]],$$
$$f^{-1}[g^{-1}[q^T]] = f^{-1}[PC(g,q)^T],$$
$$f^{-1}[PC(g,q)^T] = PC(f,PC(g,q))^T.$$

Отже в результаті ми маємо:

$$PC(f \bullet g,q)^T = PC(f,PC(g,q))^T.$$

Аналогічно можна отримати:

$$PC(f \bullet g,q)^F = PC(f,PC(g,q))^F.$$

Таким чином обидві умови виконуються, звідки маємо:

$$PC(f \bullet g,q) = PC(f,PC(g,q)).$$

Залишається остання рівність, а саме:

$$PC(IF(r,f,g),q) = (r \to PC(f,q)) \wedge$$
$$\wedge (\neg r \to PC(g,q)) \wedge (r \to r).$$
$$PC(IF(r,f,g),q)^T = (r \to PC(f,q))^T \cap$$
$$\cap (\neg r \to PC(g,q))^T \cap (r \to r)^T.$$
$$PC(IF(r,f,g),q)^F = (r \to PC(f,q))^F \cup$$
$$\cup (\neg r \to PC(g,q))^F \cup (r \to r)^F.$$

Покажемо що це так для області істинності, для області хибності доведення аналогічне.

$$PC(IF(r,f,g),q)^T = IF(r,f,g)^{-1}[q^T],$$
$$IF(r,f,g)^{-1}[q^T] = (r^T \cap f^{-1}[q^T]) \cup (r^F \cap g^{-1}[q^T]).$$

Розпишемо праву частину, отримаємо:

$$(r^F \cup f^{-1}[q^T]) \cap (r^T \cup g^{-1}[q^T]) \cap (r^T \cup r^F).$$

Розкриємо дужки при першій операції перетину:

$$((r^F \cap g^{-1}[q^T]) \cup (f^{-1}[q^T] \cap r^T) \cup$$
$$\cup (f^{-1}[q^T] \cap g^{-1}[q^T])) \cap (r^T \cup r^F).$$

Знову розкриємо дужки і одразу скоротимо, отримаємо:

$$(r^F \cap g^{-1}[q^T]) \cup (f^{-1}[q^T] \cap r^T) \cup (f^{-1}[q^T] \cap$$
$$\cap g^{-1}[q^T] \cap r^T) \cup (f^{-1}[q^T] \cap g^{-1}[q^T] \cap r^F).$$

Очевидно, що:

$$(f^{-1}[q^T] \cap g^{-1}[q^T] \cap r^T) \subset (f^{-1}[q^T] \cap r^T),$$
$$(f^{-1}[q^T] \cap g^{-1}[q^T] \cap r^F) \subset (g^{-1}[q^T] \cap r^F).$$

Звідки, підсумовуючи все, отримуємо:

$$(r \to PC(f,q))^T \cap (\neg r \to PC(g,q))^T \cap (r \to r)^T =$$
$$= (r^T \cap f^{-1}[q^T]) \cup (r^F \cap g^{-1}[q^T]).$$

Отже для області істинності вірно.

Зауважимо, що диз'юнкт ($r \to r$) не є зайвим, бо він потрібний для правильної побудови області істинності.

Запишемо для області хибності.

$$PC(IF(r,f,g),q)^F = IF(r,f,g)^{-1}[q^F],$$
$$IF(r,f,g)^{-1}[q^F] = (r^T \cap f^{-1}[q^F]) \cup (r^F \cap g^{-1}[q^F]),$$

Звідси

$$(r \to PC(f,q))^F \cup (\neg r \to PC(g,q))^F \cup (r \to r)^F =$$
$$= (r^T \cap f^{-1}[q^F]) \cup (r^F \cap g^{-1}[q^F]).$$

Отримуємо бажану рівність, звідки:

$$PC(IF(r,f,g),q) = (r \to PC(f,q)) \wedge$$
$$\wedge (\neg r \to PC(g,q)) \wedge (r \to r).$$

Отже теорему доведено.

Для означеної композиції зберігається властивість $PC(pr,q)(d)\downarrow = F \Leftrightarrow q(pr(d))\downarrow = F$. Отже проблему пошуку спростування трійки Флойда-Хоара $\{p\}pr\{q\}$ можна звести до проблеми пошуку спростування $p \to PC(pr,q)$, що виражає наступна лема.

Лема 2.

$$(p \to PC(pr,q))(d)\downarrow = F \Leftrightarrow FH(p,pr,q)(d)\downarrow = F.$$

Доведення. Розглянемо наступні твердження:

$$(p \to PC(pr,q))(d)\downarrow = F \Leftrightarrow p(d) = T \wedge$$
$$\wedge PC(pr,q))(d)\downarrow = F,$$

$$PC(pr,q))(d)\downarrow = F \Leftrightarrow d \in pr^{-1}[q^F],$$

$$d \in p^T \wedge d \in pr^{-1}[q^F] \Leftrightarrow d \in FH(p,pr,q)^F,$$

$$d \in FH(p,pr,q)^F \Leftrightarrow FH(p,pr,q)(d)\downarrow = F.$$

Отже твердження леми доведено.

Таким чином, ми отримуємо можливість елімінувати композицію Флойда-Хоара. Це дозволяє звести формули трьохосновної програмної логіки до формул двохосновної композиційно-номінативної логіки предикатів [6], яка є простішою та більш дослідженою, ніж програмна логіка.

Висновки

Для монотонних логік Флойда-Хоара було дано визначення предикатного перетворювача побудови умови за прообразом.

Як вже було зазначено, при визначені відповідної композиції було поставлено дві основні вимоги: отримана композиція має бути монотонною, та має дозволяти перевіряти чи є спростування довільної трійки Флойда-Хоара з заданими післяумовою та програмою.

Для обраної множини композицій програмного рівня було наведено правила, що дозволяють за допомогою синтаксичних перетворень визначити умову за прообразом для програми, тобто терму відповідної алгебри без циклів.

Все вищезазначене дає нам змогу перейти від розгляду програми та післяумови до розгляду умови за прообразом і таким чином від рівня програмних логік перейти до рівня предикатних, або предикатно-функціональних логік.

Список використаних джерел

1. *Нікітченко М.С., Криволап А.В.* Семантичні властивості монотонних логік Флойда-Хоара / М.С. Нікітченко, А.В. Криволап // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки. – 2012. – №3. – С. 215-222.
2. *Нікітченко М.С. Композиційно-номінативній підхід до уточнення поняття програми* / М.С. Нікітченко // Проблеми програмування. – 1999. – № **1**. – С. 16–31.
3. *Нікітченко М.С. Теорія програмування. Частина 1.* / М.С. Нікітченко. – Ніжин: видавничий дім НДУ імені Миколи Гоголя, 2010. – 129 с.
4. *Edsger W. Dijkstra* Guarded commands, nondeterminacy and formal derivation of program / Edsger W. Dijkstra // Communications of the ACM. – 1975. – №18(8). – P. 453–457.
5. *Буй Д.Б., Кахута Н.Д. Властивості теоретико-можинних конструкцій повного образу та обмеження* / Д.Б. Буй, Н.Д. Кахута // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки. – 2005. – №2. – С. 232-240.
6. *Nikitchenko M.S., Tymofieiev V.G.*: Satisfiability in Composition-Nominative Logics // Central European Journal of Computer Science.– 2012.– Vol. **2**, issue **3**.– P. 194–213.

References

1. NIKITCHENKO, M., KRYVOLAP, A. (2012) Semantychni vlastyvosti monotonnykh logic Floyda-Khoara. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physics & Mathematics.* 3. p. 215-222.
2. NIKITCHENKO, M. (1999) Kompositsionno-nominativnyy podkhod k utochneniyu ponatiya programmy. *Problems in programming.* 1. p. 16-31.
3. NIKITCHENKO, M. (2010) *Teoriya programuvanna. Chastyna 1.* Nizhyn: vydavnichiy dim NDU imeni Mykoly Hohola.
4. DIJKSTRA, E. (1975) Guarded commands, nondeterminacy and formal derivation of program. *Communications of the ACM*. 18(8) p. 453-457.
5. BUY, D., KAHUTA, N. (2005) Vlastyvosti teoretyko-mozhynnykh konstruktsiy povnoho obrazu ta obmezhenna. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physics & Mathematics.* 2. p. 232-240.
6. NIKITCHENKO, M., TYMOFIEIEV. V. (2012) Satisfiability in Composition-Nominative Logics. *Central European Journal of Computer Science*. 2(3). p. 194–213

Надійшла до редколегії 28.04.14

УДК 519.2

Савкіна М. Ю.[1], к.ф.-м.н.,с.н.с.

Оцінювання параметрів лінійної регресійної моделі неповного рангу

[1]Інститут математики НАН України, 01601, м. Київ, вул. Терещенківська, 3,
e-mail: marta@imath.kiev.ua

M.Yu.Savkina[1],PhD.,Senior Scientific Researcher

Estimation of parameters of linear regression model of incomplete grade

[1] Institute of mathematics of NASU, 01601, Kyiv,Tereschenkovskaya street, 3,
e-mail:marta@imath.kiev.ua

Розглядається модель лінійної регресії, матриця плану якої має неповний ранг. Ранг матриці плану r на одиницю менше кількості факторних змінних в моделі. Знайдено зв'язок між оцінкою невідомих параметрів такої моделі, отриманої за допомогою метода ідентифікуючих обмежень, та оцінкою, отриманою завдяки зведенню вихідної моделі до моделі повного рангу.

Ключові слова: матриця плану, модель неповного рангу, ідентифікуючі обмеження.

The linear regression model, the matrix of plan of which has an incomplete grade, is examined. Grade of matrix of plan r is on unit less amount of factor variables in the model. Connection is found between estimation of unknown parameters of such model, got by method of identifying limitations, and estimation, got due to bringing of initial model to model of complete grade. First estimation - vector of order r, second -vector of order $r-1$.

More precisely, a transition matrix from one vector to other is found. This matrix has dimension $r \times (r-1)$, it is sum of two matrices. First $r-1$ lines of the first matrix form a single matrix, last line is zeroline. The second matrix is the product of a column vector to a row vector and a certain number.First $r-1$ elements of the column vector are coefficients of decomposition of r-th factor variable for other, last element is equal to minus one. The row vector consists from first $r-1$ coefficients of identifying limitation. The number is the difference between the last coefficient of identifying limitation and number obtained by multiplying the above-mentioned row vector to the above-mentioned column vector.

Keywords: matrix of plan, model of incomplete grade, identifying limitations.

Статтю представив д.т.н.,проф. Кудін В.І.

Розглянемо модель лінійної регресії

$$\vec{y} = X\vec{\beta} + \vec{\varepsilon},$$

де $\vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$- відклик,

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{pmatrix} -$$

регресійна матриця розміру $n \times m$ $(n \geq m)$, j-й стовпець якої $-n$ спостережень регресора x_j , $\vec{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)^T$ —вектор випадкових відхилень, $\vec{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m)^T$- вектор невідомих параметрів, який підлягає оцінюванню.

В класичній регресії передбачається, що $rang\ X = m,$ тобто стовпці матриці X лінійно незалежні.

Поширенішим методом оцінювання невідомих параметрів в регресійному аналізі є метод найменших квадратів (МНК), який полягає в мінімізації суми

$$\sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j^2$$

відносно вектора $\vec{\beta}$.Для знаходження оцінки $\vec{\beta}$ маємо систему нормальних рівнянь [1]

$$X^T X\vec{b} = X^T\vec{y}, \qquad (1)$$

єдиний розв'язок якої

$$\vec{b} = (X^T X)^{-1} X^T\vec{y},$$

а мінімальне значення $\sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j^2$, яке називається залишковою сумою квадратів, дорівнює $\vec{y}^T\vec{y} - \vec{b}^T X^T X\vec{b}$. Вектор $\vec{b} = (b_1, b_2, \dots, b_m)^T$ називається оцінкою МНК вектора $\vec{\beta}$.

Але в деяких випадках буває, що $rang\ X = r\ (r < m)$(наприклад, при плануванні

©М.Ю.Савкіна, 2014

експерименту елементи матриці вибирають рівними тільки нулю та одиниці, при цьому стовпці матриці можуть виявитися лінійно залежними). Система нормальних рівнянь (1) в цьому випадку має ціле сімейство розв'язків, а величина $\sum_{j=1}^{n}\varepsilon_j^2$ досягає мінімума при $\vec{\beta}=\vec{b}$, де $\vec{b}$-будь-який з розв'язків системи (1), причому длякожного ненульового вектора $\vec{y}$ значення $\vec{y}^T\vec{y}-\vec{b}^TX^T\vec{y}$ єдине.

Одним з методів відшукання розв'язку системи у випадку, коли матриця плану маєнеповнийранг, є метод ідентифікуючих обмежень.

Нехай

$$H=\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1m} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ h_{m-r,1} & h_{m-r,2} & \dots & h_{m-r,m} \end{pmatrix}$$

матриця розміру $(m-r)\times m$ така, що матриця

$$\begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1m} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ x_{n1} & \dots & x_{nm} \\ h_{11} & \dots & h_{1m} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ h_{m-r,1} & \dots & h_{m-r,m} \end{pmatrix}$$

має ранг m.

Метод ідентифікуючих обмежень полягає в введенні сукупності обмежень вигляду

$$H\vec{\beta}=\vec{\theta}, \qquad (2)$$

яка дозволяє запобігти невизначеності при відшуканні розв'язку системи (1).

Розглянемо випадок, коли $r=m-1$. Матрицю X без обмеження узагальненості можна подати у вигляді

$$X=\begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1,m-1} & \sum_{i=1}^{m-1}\alpha_i x_{1i} \\ x_{21} & \dots & x_{2,m-1} & \sum_{i=1}^{m-1}\alpha_i x_{2i} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_{n1} & \dots & x_{n,m-1} & \sum_{i=1}^{m-1}\alpha_i x_{ni} \end{pmatrix},$$

де $\alpha_1,\dots,\alpha_{m-1}$- деякі сталі, а сукупність обмежень (2) перетворюється на

$$h_{11}\beta_1+\dots+h_{1m}\beta_m=0. \qquad (3)$$

Інший метод відшукання розв'язку системи (1) у випадку, коли матриця плану має неповний ранг, полягає в зведенні вихідної моделі до моделі повного рангу.

Позначимо

$$\vec{b}^{(-)}=\left(\overline{X}^T\overline{X}\right)^{-1}\overline{X}^T\vec{y},$$

де

$$\overline{X}=\begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1,m-1} \\ x_{21} & \dots & x_{2,m-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ x_{n1} & \dots & x_{n,m-1} \end{pmatrix}.$$

При цьому

$$X=\overline{X}I^{(\alpha)}, \qquad (4)$$

де

$$I^{(\alpha)}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & \alpha_1 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & \alpha_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & 1 & \alpha_{m-1} \end{pmatrix}.$$

Використовуючи факторізацію (4), можна подати $X\vec{\beta}$ у вигляді$X\vec{\beta}=\overline{X}I^{(\alpha)}\vec{\beta}=\overline{X}\vec{\beta}^{(-)}$. Нехай $\vec{b}^{(H)}=\left(b_1^{(H)},b_2^{(H)},\dots,b_m^{(H)}\right)^T$ – оцінка МНК вектора$\vec{\beta}$принаявності обмежень (3). Наступна теорема дає зв'язок між оцінками $\vec{\beta}^{(-)}$ та $\vec{b}^{(H)}$.

Теорема. Нехай

$$\vec{\alpha}^{(1)}=(\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_{m-1},-1)^T;$$

$$\vec{h}_m=\left(h_{11},h_{12},\dots,h_{1,m-1}\right)^T;$$

$$s=h_{1m}-\alpha_1h_{11}-\dots-\alpha_{m-1}h_{1,m-1};$$

$I_{m-1}^{(0)}$ – матриця порядку $m\times(m-1)$, перші $m-1$ строк якої утворюють одиничну матрицю, остання строка –нульова.

Тоді

$$\vec{b}^{(H)}=\left(I_{m-1}^{(0)}+s^{-1}\vec{\alpha}^{(1)}\vec{h}_m^T\right)\vec{b}^{(-)}. \qquad (5)$$

Доведення. Згідно з [1] оцінку невідомого вектора $\vec{\beta}$ при наявності обмежень (3) можна знайти як розв'язок системи рівнянь

$$G^TG\vec{b}^{(H)}=X^T\vec{y},$$

де

$$G=\begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1,m-1} & \sum_{i=1}^{m-1}\alpha_i x_{1i} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_{n,1} & \dots & x_{n,m-1} & \sum_{i=1}^{m-1}\alpha_i x_{ni} \\ h_{11} & \dots & h_{1,m-1} & h_{1m} \end{pmatrix}.$$

За правилом Крамера маємо

$$b_j^{(H)}=\frac{\Delta_j}{\Delta}, \qquad j=1,\dots,m, \quad (6)$$

де $\Delta = \det G^T G$, Δ_j - визначник матриці , яка утворена з матриці $G^T G$ заміною j -го стовпця на стовпець вільних членів$X^T \vec{y}$. Таким чином, маємо

$$G^T G = \begin{pmatrix} g_{11} & \cdots & g_{1,m-1} & g_{1m} \\ . & . & . & . \\ g_{m-1,1} & \cdots & g_{m-1,m-1} & g_{m-1,m} \\ g_{m1} & \dots & g_{m,m-1} & g_{mm} \end{pmatrix},$$

де

$$g_{11} = \sum_{i=1}^{n} x_{i1}^2 + h_{11}^2 \quad , \dots ,$$

$$g_{1,m-1} = \sum_{i=1}^{n} x_{i1} x_{i,m-1} + h_{11} h_{1,m-1},$$

$$g_{1m} = \sum_{i=1}^{n} x_{i1} \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} + h_{11} h_{1m},$$

$$\dots ,$$

$$g_{m-1,1} = \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1} x_{i1} + h_{1,m-1} h_{11},$$

$$\dots , g_{m-1,m-1} = \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1}^2 + h_{m-1,m-1}^2,$$

$$g_{m-1,m} = \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1} \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} + h_{m-1,1} h_{1m},$$

$$g_{1m} = \sum_{i=1}^{n} x_{i1} \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} + h_{11} h_{1m} \ , \dots,$$

$$g_{m-1,m} = \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1} \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} + h_{m-1,1} h_{1m},$$

$$g_{mm} = \left(\sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} \right)^2 + h_{1m}^2.$$

Позначимо $D = \overline{X}^T \overline{X}$, тобто

$$D = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_{i1}^2 & \dots & \sum_{i=1}^{n} x_{i1} x_{i,m-1} \\ . & . & . \\ \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1} x_{i1} & \dots & \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1}^2 \end{pmatrix}.$$

За допомогою перетворень над рядками та стовпцями матриці $\mathrm{G^T G}$, які не змінюють значення визначника, отримаємо

$$\Delta = \mathrm{s}^2 \widetilde{\Delta}, \qquad (7)$$

де $\widetilde{\Delta} = \det \mathrm{D}$.

Далі, згідно теоремі Лапласа про розкладання визначника по елементах рядка або стовпця маємо

$$\Delta_j = \Delta'_{1j} \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i1} + \Delta'_{m-1,j} \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i,m-1} + \\ + \Delta'_{mj} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} \right), \qquad (8)$$
$$j = 1, \dots, m,$$

де $\Delta'_{1j}, \dots , \Delta'_{mj}$ – алгебраїчні доповнення до елементів $g_{1j}, \dots, g_{mj}$матриці $G^T G$ відповідно.

Перепишемо (8) у вигляді

$$\Delta_j = \left(\Delta'_{1j} + \alpha_1 \Delta'_{mj} \right) \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i1} + \dots + \\ + \left(\Delta'_{m-1,j} + \alpha_{m-1} \Delta'_{mj} \right) \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i,m-1}, \qquad (9)$$
$$j = 1, \dots, m.$$

Позначимо

$$\vec{h}_1 = \begin{pmatrix} s + \alpha_1 h_{11} \\ \alpha_1 h_{12} \\ \vdots \\ \alpha_1 h_{1,m-1} \end{pmatrix},$$

$$\vec{h}_j = \begin{pmatrix} \alpha_j h_{11} \\ \vdots \\ \alpha_j h_{1,j-1} \\ s + \alpha_1 h_{1j} \\ \alpha_j h_{1,j+1} \\ \vdots \\ \alpha_j h_{1,m-1} \end{pmatrix}, j = 2, \dots, m-2,$$

$$\vec{h}_{m-1} = \begin{pmatrix} \alpha_{m-1} h_{11} \\ \vdots \\ \alpha_{m-1} h_{1,m-2} \\ s + \alpha_1 h_{1,m-1} \end{pmatrix}.$$

Розглянемо сімейство матриць $\{D_{jk}, j = 1, \dots, m, k = 1, \dots, m-1\}$, в якому матриця D_{jk} утворена з матриці D таким чином, що замість k-го стовпця стоїть стовпець $\vec{h}_j$.

За допомогою перетворень над рядками та стовпцями матриці, які не змінюють значення визначника, отримаємо

$$\Delta'_{kj} + \alpha_k \Delta'_{mj} = s \det D_{jk}, \quad (10)$$
$$j = 1, \dots, m-1, k = 1, \dots, m,$$

$$\Delta'_{km} + \alpha_k \Delta'_{mm} = -s \det D_{mk}, \quad (11)$$

Підставляємо (10) та (11) в (9); отримаємо

$$\Delta_j = s \left[\det D_{j1} \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i1} + \dots + \det D_{j,m-1} \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i,m-1} \right], \quad (12)$$
$$j = 1, \dots, m.$$

Далі,

$$\det D_{jk} = s \det D_{jk}^{(0)} + \alpha_j \det D_{mk}, \quad (13)$$
$$j = 1, \dots, m-1,$$

де $D_{jk}^{(0)}$ - матриця, яка утворена з матриці D таким чином, що замість j-го стовпця стоїть j-й стовпець одиничної матриці.

З (6), (7), (12) та (13) маємо

$$b_j^{(H)} == s^{-1} \left[\left(s\, z_{j1}^{(0)} + \alpha_j z_1 \right) \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i1} + \dots + \left(s\, z_{j,m-1}^{(0)} + \alpha_j z_{m-1} \right) \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i,m-1} \right], \quad (14)$$
$$j = 1, \dots, m-1,$$

$$b_m^{(H)} = s^{-1} \left[z_1 \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i1} + \dots + z_{m-1} \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i,m-1} \right], \quad (15)$$

де

$z_{j1}^{(0)}, j = 1, \dots, m-1, k = 1, \dots, m-1,$- елементиматриці$D^{-1}$,

$\vec{z}^{(H)} = (z_1, \dots, z_{m-1})^T$ - розв'язок системи рівнянь $D\vec{z} = \vec{h}_m$.

Далі, з (14) та (15) отримаємо

$$\vec{b}^{(H)} = \left(I_{m-1}^{(0)} D^{-1} + s^{-1} \vec{\alpha} \left(\vec{z}^{(H)} \right)^T \right) \overline{X} \vec{y} =$$

$$= \left(I_{m-1}^{(0)} D^{-1} + s^{-1} \vec{\alpha} \left(D^{-1} \vec{h}_m \right)^T \right) \overline{X} \vec{y} =$$

$$= \left(I_{m-1}^{(0)} + s^{-1} \vec{\alpha}^{(0)} \vec{h}_m^T \right) D^{-1} \overline{X} \vec{y}. \quad (16)$$

Враховуючи $D = \overline{X}^T \overline{X}$ маємо

$$\vec{b}^{(-)} = D^{-1} \overline{X} \vec{y},$$

тобто з (16) отримаємо (5) .

Теорему доведено.

Список використаних джерел

1. *Себер Дж.* Линейный регрессионный анализ /Себер Дж.– Москва: Мир, 1980. – 336 с.
2. *Курош А.Г.* Курс высшей алгебры. /Курош А.Г. – Москва: Наука, 1971. – 432 с.

References

1. SEBER G. (1980) Linear regression analysis. Moscow: Mir.
2. KUROSH A.G. (1971) Course of higher algebra. Moscow: Nauka.

Надійшла до редколегії 17.04.2014.

УДК 519.8

Семенова Н. В.[1], д.ф.-м.н., пров.н.с.
Олійник С. В.[2], аспірант

Декомпозиційний метод розв'язання задач частково комбінаторної оптимізації

[1] Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, 03680, ГСП, м. Київ, пр. Акад. Глушкова , 40,
e-mail: nvsemenova@meta.ua
[2] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: svetlana22.07@mail.ru

N. V. Semenova[1], doctor of physical and mathematical sciences, leading researcher
S. V. Oliinyk[2], graduate student.

Decomposition Method for solving of mixed combinatorial problems

[1] V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of NAS of Ukraine, 40 Glushkova ave., Kyiv, Ukraine, 03187
e-mail: nvsemenova@meta.ua
[2] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: svetlana22.07@mail.ru

Досліджено задачі частково дискретної оптимізації на комбінаторній множині перестановок. На основі вивчення властивостей допустимої області задачі побудовано та обґрунтовано декомпозиційний метод знаходження її розв'язків, що заснований на поєднанні ідей методу Бендерса і поліедрального підходу.

Ключові слова: *дискретна оптимізація, комбінаторна множина, перестановки, методи декомпозиції, релаксація.*

Investigated partially discrete optimization problem considering the combinatorial sets of the permutations. Also investigated some properties of feasible region these problem. Exact and approximate decomposition algorithms for solving mentioned problems were constructed and justified. Specified algorithms based on a combination of ideas Benders' Method and polyhedral approach for partially combinatorial problems. The algorithm terminates after solving a finite number of subproblems. The result of the algorithm is the optimal solution of the problem or construction of such set of constraints in which the modified problem will not have solutions, thus primary problem will not have solutions too. Proved finiteness of algorithm. Proposed algorithm, definitions, theorems and conclusions make it possible to apply the classical methods of continuous optimization to solving partially combinatorial problems on the set of permutations and on this basis to develop new and original methods for solving problems using properties of combinatorial sets and their convex hulls.

Key Words: discrete optimization, combinatorial set of permutations, decomposition methods, relaxation.

Статтю представив доктор техн. наук, проф. Гаращенко Ф.Г.

Одним із перспективних підходів до розв'язання складних задач дискретної оптимізації є декомпозиційний підхід, який здійснює пошук розв'язків вхідної задачі шляхом розв'язання ряду незалежних підзадач меншої розмірності [1−4]. Для розв'язання задач комбінаторної оптимізації розроблені різні обчислювальні методи. Найбільш перспективні з них складають окрему область поліедральної комбінаторики [2,3,5]. Загальна ідея цих методів полягає у встановленні зв'язку екстремальних комбінаторних задач з методами лінійного програмування: елементи допустимої множини інтерпретуються як точки евклідового простору, функції цілі і обмежень розглядаються як неперервні. Таким чином, розв'язується задача знаходження екстремуму функції на опуклій оболонці заданих точок, тобто на опуклому многограннику. Як відомо, екстремум лінійної функції на многограннику досягається в одній з вершин, яка включається в комбінаторну множину елементів, що розглядаються.

© Н.В. Семенова, С.В. Олійник, 2014

Особливість розв'язування комбінаторних задач при такому зведенні полягає в тому, що при знаходженні розв'язків можна обмежуватися лише вершинами многогранника.

Розглянемо частково дискретну задачу оптимізації вигляду $P1$:

$$\min\left\{c^T x + f(y) \mid Ax + F(y) \ge b, x \ge 0, y \in S\right\}.$$

Матриця A має розмірність $m \times n$, x та c – n-вимірні вектори, f – скалярна функція від y, F – m-вектор, компонентами якого є функції від y, b – m-вектор, y – q-вимірний вектор, а S – комбінаторна множина перестановок. Задача $P1$ є частково дискретною, де деякі змінні є неперервними, а деякі комбінаторними. Оскільки $P1$ лінійна по x при фіксованих значеннях y, логічно розв'язувати її шляхом фіксації y, розв'язання лінійного програмування (ЛП) відносно x, отримання кращого значення y тощо. Отже, можуть розглядатися тільки такі значення y, для яких існує x, що задовольняє обмеження, тобто вектор y повинен належати множині $R = \{y \mid \exists x \ge 0 : Ax \ge b - F(y), y \in S\}$.

Для того щоб у явній формі отримати обмеження, що визначають множину R, скористаємось лемою Фаркаша [4].

Лема. Існує вектор $x \ge 0$, що задовольняє умови $Bx = a$ тоді і тільки тоді, коли $a^T u \ge 0 \ \forall u$, що задовольняють $B^T u \ge 0$.

Зафіксувавши $y \in S$ і застосувавши лему до системи лінійних рівностей і нерівностей $Ax - s = b - F(y), \quad x \ge 0, s \ge 0,$ приходимо до висновку, що y допустимий, тоді і тільки тоді, коли виконується умова

$$(b - F(y))^T u \le 0 \qquad (1)$$

$\forall u$, що задовольняють $A^T u \le 0, u \ge 0.$

Позначимо $C = \{u \mid A^T u \le 0, u \ge 0\}$ многогранний конус, він визначається скінченою кількістю твірних, тобто $\exists u_i^r, i = 1,...n_r$ такі, що $\forall u \in C$ може бути представленим у вигляді $u = \sum_{i=1}^{n_r} \lambda_i u_i^r, \lambda_i = 0.$ Підставляючи останній вираз в (1), отримаємо $\sum_{i=1}^{n_r} \lambda_i (b - F(y))' u_i^r \le 0,$ що справедливо $\forall \lambda_i \ge 0$, тоді і тільки тоді, коли

$$(b - F(y))^T u_i^r \le 0, i = 1,..., n_r. \qquad (2)$$

Таким чином, вектор $y \in S$ допустимий, тоді і тільки тоді, коли він задовольняє скінченній системі обмежень (2). Множина R тепер може бути представлена у вигляді

$$R = \left\{y \mid (b - F(y))^T u_i^r \le 0, i = 1,..., n_r, y \in S\right\}. \qquad (3)$$

Якщо R порожня, тоді вхідна задача $P1$ не має допустимого розв'язку. Припускаючи, що R не порожня, перепишемо $P1$ у вигляді

$$\min_{y \in R}\left\{ f(y) + \min\left\{c^T x \mid Ax \ge b - F(y), x \ge 0\right\}\right\}.$$

Для фіксованого y внутрішня мінімізація цієї задачі є задачею ЛП. Запишемо відповідно пряму (4) і двоїсту (5) задачі.

$$\min\left\{c^T x \mid Ax \ge b - F(y), x \ge 0\right\}. \qquad (4)$$

$$\max\left\{(b - F(y))^T u \mid A^T u \le c, u \ge 0\right\}. \qquad (5)$$

Якщо $y \in R$, то пряма задача (4) допустима і в силу теореми двоїстості маємо рівність

$$\begin{aligned} &\min\{c^T x \mid Ax \ge b - F(y), x \ge 0\} = \\ &= \max\{(b - F(y))^T u \mid A^T u \le c, u \ge 0\}, \end{aligned} \qquad (6)$$

де значення максимуму береться рівним $-\infty$, якщо двоїста задача недопустима. Отже, співвідношення (6) сумують твердження, що якщо пряма має необмежений розв'язок, то двоїста недопустима, в той час коли обидві задачі допустимі, то вони мають скінчений оптимальний розв'язок з рівними значеннями цільових функцій. Враховуючи вищезазначене приходимо до нової форми задачі $P1$:

$$\min_{y \in R}\{ f(y) + \max\{(b - F(y))^T u \mid A^T u \le c, u \ge 0\}\}$$

Розглянемо множину обмежень двоїстої задачі $P = \{u \mid A^T u \le c, u \ge 0\}$. Обмеження не залежать від y. Якщо $P = \varnothing$, то двоїста задача (5) має необмежений розв'язок як і вхідна задача $P1$. Якщо $P \ne \varnothing$, то внутрішній максимум задачі $P1$ досягається в одній з вершин $u_i^p \in P$, $i = 1,..., n_p$, або прямує до ∞ вздовж крайнього променя $u_i^r, i = 1,...n_r$, множини P. В цьому випадку задача (4) недопустима, що суперечить вхідним припущенням, отже можна обмежитись розглядом тільки крайніх точок P. Задача $P1$,

враховуючи означення R, може бути записана у вигляді задачі $P2$:

$$\min\{z \mid z \ge f(y) + (b - F(y))^T u_i^p, i = 1,...,n_p,$$

$$(b - F(y))^T u_i^r \le 0, i = 1,...,n_p,\ y \in S\}$$

Позначивши G множину, що описується обмеженнями задачі $P2$, переходимо до нового запису цієї задачі: $\min\{z \mid (z,y) \in G\}$.

Теорема 1. Справедливі такі твердження.

1) Задача $P1$ не має допустимих розв'язків тоді і тільки тоді, коли множина G порожня.

2) Якщо $(\overline{z}, \overline{y})$ – розв'язок задачі $P2$ та $\overline{x}$ є розв'язком задачі ЛП

$$\min\{c^T x \mid Ax \ge b - F(\overline{y}), x \ge 0\}, \qquad (7)$$

тоді $(\overline{x}, \overline{y})$ є розв'язком $P1$ і $\overline{z} = c^T \overline{x} + f(\overline{y})$;

3) якщо $(\overline{x}, \overline{y})$ є розв'язком задачі $P1$ та $\overline{z} = c^T \overline{x} + f(\overline{y})$, тоді $(\overline{z}, \overline{y})$ є розв'язком $P2$.

Таким чином, розв'язання вхідної задачі $P1$ зводиться до послідовного розв'язання задачі комбінаторної оптимізації з однією неперервною змінною вигляду $P2$ і задачі ЛП вигляду (7). Якщо задача $P2$ не має допустимих розв'язків, то не має допустимих розв'язків і задача $P1$. Якщо $P2$ має оптимальний розв'язок $(\overline{z}, \overline{y})$, то для побудови оптимального розв'язку $(\overline{x}, \overline{y})$ задачі $P1$ потрібно розв'язання задачі (7). Для знаходження розв'язків задачі $P2$ треба виписати всі обмеження, що визначають область G. Але знаходження оптимального розв'язку задачі $P2$ більш важливо, ніж сама множина G, тому достатньо побудувати тільки ті обмеження G, що визначають оптимальний розв'язок цієї задачі. Застосуємо підхід релаксації [4]. Почнемо з урахування тільки невеликої кількості обмежень та будемо розв'язувати модифіковані таким чином задачі $P2$, які позначатимемо $MP2$.

$$\min\{z \in S \mid z \ge f(y) + (b - F(y))^T u_i^p, i \in I_1,$$

$$(b - F(y))^T u_i^r \le 0, i \in I_2\},$$

де $I_1 \subset \{1,...,n_p\}$, $I_2 \subset \{1,...,n_r\}$. Нехай G' – множина всіх (z,y), що задовольняють обмеження $MP2$. $G' \supseteq G$. Таким чином, розв'язок $MP2$ оптимальний для $P2$, тоді і тільки тоді, коли він належить G, тобто задовольняє всі обмеження $P2$. Звичайно, ці обмеження в явній формі недоступні, оскільки заздалегідь не обчислені всі крайні точки та промені множини P. Однак для перевірки належності до G або генерації нових обмежень можуть бути використані задачі ЛП вигляду (4) та (5).

Сформулюємо критерій оптимальності. [4].

Теорема 2 Оптимальний розв'язок $(\overline{z}, \overline{y})$ задачі $MP2$ є оптимальним розв'язком $P2$ тоді і тільки тоді, коли виконується рівність

$$\max\{(b - F(\overline{y}))^T u \mid A^T u \le c, u \ge 0\} = \overline{z} - f(\overline{y}).$$

Алгоритм розв'язання задачі *P*1.

1. Розв'язуємо задачу $MP2$, в якій немає жодного або є декілька обмежень задачі $P2$.

2. Якщо задача $MP2$ недопустима, тоді недопустимі $P2$ та $P1$. У протилежному випадку отримуємо оптимальний розв'язок $(\overline{z}, \overline{y})$ або інформацію про те, що цільова функція задачі необмежена. Якщо $\overline{z} = -\infty$, то виберемо за $\overline{y}$ довільний елемент S та переходимо до кроку 3.

3. Розв'язуємо двоїсту задачу ЛП (5) (або пряму (4), якщо вона допустима). Якщо задача (5) недопустима, то вхідна задача $P1$ має необмежену цільову функцію на допустимій множині. Якщо задача (5) має необмежену цільову функцію, тоді переходимо до пункту 6.

4. Якщо оптимальне значення цільової функції двоїстої задачі (5), отриманої на кроці 3, дорівнює $\overline{z} - f(\overline{y})$, тоді $(\overline{z}, \overline{y})$ є розв'язком $P2$. Якщо $\overline{x}$ – розв'язок задачі (7), то $(\overline{x}, \overline{y})$ є розв'язком $P1$.

5. Якщо у пункті 3 не виконується критерій оптимальності та двоїста задача ЛП (5) при $y = \overline{y}$ має скінченний оптимальний розв'язок $\overline{u}$, то додамо до задачі $MP2$ обмеження

$$z \ge (b - F(y))^T \overline{u} + f(y) \qquad (8)$$

та повернемося до пункту 2.

6. Якщо двоїста задача (5) при $y = \overline{y}$ має необмежений розв'язок, то симплекс-метод дозволяє знайти промінь $\overline{v}$ і точку $\overline{u}$ такі, що цільова функція цієї задачі прямує до ∞ вздовж променя $u = \overline{u} + \lambda \overline{v}, \lambda \ge 0$. Додамо до задачі $MP2$ обмеження $(b - F(y))^T \overline{v} \le 0$. Якщо при цьому має місце нерівність $\overline{z} < f(\overline{y}) + (b - F(\overline{y}))^T \overline{u}$ для крайньої точки $\overline{u}$, то додаємо обмеження вигляду (8) до $MP2$. Повертаємося до пункт 2.

Скінченна збіжність алгоритму випливає зі скінченної кількості обмежень задачі $P2$.

Теорема 3 Описаний алгоритм закінчується за скінченну кількість ітерацій зі знаходженням оптимального розв'язку задачі $P1$ або з

отриманням інформації про те, що задача *P*1 недопустима або має необмежену цільову функцію на допустимій множині.

Знаходження верхніх та нижніх границь

Достоїнством цього алгоритму є можливість обчислення верхньої та нижньої меж оптимального значення цільової функції, причому таких, що збігаються до оптимального значення тоді, коли в процесі розв'язання досягається оптимальність.

Для i-го кроку справедлива оцінка $z^i \le \min\{z \mid (z,y) \in G\} \le \min_{1\le j\le i}(c^T x^j + f(y^j))$.

Критерій оптимальності є умовою того, що верхня та нижня межі рівні. Верхня оцінка генерується послідовністю допустимих розв'язків задачі *P*1, отже, найкраща з цих оцінок може бути взята як розв'язок, якщо алгоритм закінчується раніше досягнення оптимуму.

Розв'язання комбінаторної задачі *MP2*

Нехай S – комбінаторна множина перестановок, $F(y) = By$ та $f(y) = d^T y$. Задача *P*1 в цьому випадку є лінійною задачею з комбінаторними та неперервними змінними. Задача *MP*2 є задачею комбінаторної оптимізації, для якої можна застосовувати поліедральний підхід [2, 3, 5].

Відомо [6-8], що опуклою оболонкою комбінаторної множини перестановок є загальний переставний многогранник, множина вершин якого дорівнює множині перестановок. Дана властивість многогранника перестановок дає можливість звести розв'язання задачі, визначеної на комбінаторній множині, до її розв'язання на неперервній допустимій множині.

Для цього використаємо поняття мультимножини A, яка визначається основою $S(A)$ і кратністю її елементів $k(a)$. Нехай задана мультимножина $A = \{a_1,...,a_q\}$, її основа $S(A) = \{e_1,...,e_k\}$ і кратність елементів $k(e_j) = r_j$, $j \in N_k$, $r_1 + ... + r_k = q$.

Впорядкованою n-вибіркою із мультимножини A називається набір $a = (a_{i_1},...,a_{i_n})$, де $a_{i_j} \in A$, $\forall i_j \in N_n = \{1,2,...,n\}$, $\forall j \in N_n$, $i_s \ne i_t$, $s \ne t$, $\forall s \in N_n$.

Множина перестановок з повтореннями з n дійсних чисел, серед яких k різних, називається загальною множиною перестановок, тобто множиною упорядкованих n-вибірок із мультимножини A за умови $n = q > k$. При $n = k = q$ маємо множину перестановок без повторень.

Означення 1. Множина $E(A)$, елементами якої є n-вибірки $a = (a_{i_1},...,a_{i_n})$ з мультимножини A, називається евклідовою комбінаторною множиною, якщо для довільних її елементів $a' = (a'_1,...,a'_n)$, $a'' = (a''_1,...,a''_n)$, виконуються умови: $a' \ne a''$, тоді і тільки тоді, коли $\exists\, j \in N_n$: $a'_j \ne a''_j$.

Означення 2. Перестановкою скінченної множини A називається довільна бієктивна функція $\pi : A \to A$. Якщо $|A| = p$, то існує $p!$ різних перестановок.

Вважаємо, що елементи мультимножини упорядковані за неспаданням: $a_1 \le ... \le a_q$. Нехай P_q – множина всіх перестановок з q чисел мультимножини A. Кожній перестановці $a = (a_1,...,a_q) \in P_q$ поставимо у відповідність $y = (y_1,...,y_q) \in R^q$ за правилом $y_i = a_{j_i}$, i, $j \in N_q$.

Означення 3. Опуклу оболонку точок $\{a^i = (a_{i_1},...,a_{i_q}) : \forall a^i \in P_q\}$ будемо називати многогранником перестановок і позначати Π_{qk}.

Теорема 4 [6-8]. Многогранник перестановок задається наступною системою лінійних обмежень: $\sum_{j=1}^{q} y_j = \sum_{j=1}^{q} a_j$, $\sum_{j=1}^{i} y_{a_j} \ge \sum_{j=1}^{i} a_j$, $a_j \in N_q$, $a_j \ne a_t : \forall j \ne t$, $i, j \in N_i$, $\forall i \in N_{q-1}$.

Отже, комбінаторну множину перестановок P_q можна описати у вигляді многогранника $\Pi_{qk}(A)$, вершинами якого є перестановки. $\Pi_{qk}(A) = \operatorname{conv} P_{qk}(A)$. Введемо наступні позначення. Допустиму область G задачі *MP*2 запишемо у вигляді $G = \left\{x \in R^n \mid Hx \le g\right\}$, $g = \left(g_1,...,g_p\right)$, $H \in R^{p\times n}$, H – матриця, яка використовується для матрично-векторної форми запису лінійних нерівностей, що описують многогранник перестановок $\Pi_{qk}(A)$ і обмежень задачі *MP*2, де всі обмеження зведені до одного ($\le$) вигляду нерівностей. Позначимо N_p множину, елементи якої визначають номери обмежень лінійних нерівностей, що описують многогранник $\Pi_{qk}(A)$ і обмежень задачі *MP*2:

$N_p = \{1, 2, ..., 2^n + m_S\}$. Визначимо такі множини: $G_i = \left\{ x \in R^n \middle| (h_i)^T y \le g_i \right\}$, $i \in N_p$; $\forall\, y^s \in R^q$:

$N^a(y^s) = \left\{ i \in N_p \middle| (h_i)^T y^s = g_i \right\}$,

$N^n\left(y^s\right) = \left\{ j \in N_p \middle| (h_i)^T y^s < g_j \right\}$ – відповідно множини номерів активних та неактивних обмежень у точці y^s; $h_i \in R^q$, $g_i \in R, i \in N_p$ – відповідно *i*-ий рядок матриці *H* та *i*-а компонента вектора g.

Введемо до розгляду задачу, яка розв'язується на *s*-му кроці алгоритму: $Z\left(z, G^s\right) : \max\left\{ z \,|\, (z, y) \in G^s \right\}$. В ній допустима множина $G^s = \left\{ x \in R^n \middle| \langle h_i, x \rangle \le g_i, i \in Q_S \subset N_p \right\}$, де Q_S – множина номерів обмежень, що описують допустиму область задачі $Z\left(z, G^s\right)$, $Q_S = N_p \setminus R_S$, R_S – множина номерів обмежень, які не були включені в цю задачу на *s*-му кроці.

Означення 4. Величина $r_i(y) = \langle h_i, y \rangle - g_i$, $i \in N_p$, називається відхиленням точки $y \in R^q$ від границі множини G^i, а величина $r(y) = \max\left\{ r_i(y) \middle|\, i \in N_p \right\}$ – відхиленням точки $y \in R^q$ від границі множини *G*.

Теорема 5. Оптимальний, розв'язок (z, y) задачі $Z\left(z, G^s\right)$ є оптимальним розв'язком задачі *MP2* тоді і тільки тоді, коли виконується умова $r(y) \le 0$.

Доведення. Необхідність цього твердження очевидна, оскільки допустимий розв'язок (z, y) задачі $Z\left(z, G^s\right)$ є допустимим розв'язком задачі *MP2* тоді і тільки тоді, коли виконується умова $r(y) \le 0$. Достатність твердження випливає з побудови задачі *MP2* і означення $r(y) \le 0$.

Загальна ідея запропонованого методу полягає у послідовному включенні обмежень задачі, що описують область допустимих розв'язків. Реалізація методу у вигляді алгоритму описана нижче.

Алгоритм розв'язання задачі *MP2*

Початковий крок. Нехай $\bar{z} = \infty, s = 0$.

1. Як початкову точку y^s вибираємо деякий елемент загальної множини перестановок.

2. Опишемо обмеження, які відповідають точці $y^s \in \Pi^s_{qk}$ і визначають вершину загального многогранника перестановок, Π_{qk}, $\Pi^s_{qk} \supset \Pi_{qk}$.

3. Знаходимо відхилення $r_i(y^s)$, $\forall i \in N_p \setminus N_1$, p - загальне число обмежень, 1 – число обмежень многогранника перестановок.

4. Вибираємо $r(y^s) = \max\{ r_i(y^s) \,|\, i \in N_p \setminus N_1 \}$ і номер $i_s \in N_p$, при якому досягається максимум.

5. Перевіряємо нерівність $r(x^s) \le 0$. Якщо вона виконується, то точка y^s – оптимальний розв'язок задачі. Якщо $r(y^s) > 0$, то обмеження не виконуються і переходимо до наступного пункту.

6. Додаємо отримане обмеження з номером i_s до обмежень задачі $Z\left(z, G^s\right)$. Формуємо допустиму множину задачі таким чином:

$$G^{s+1} = G^k \text{ I } \{ y \in R^s \,|\, \langle h_i, x \rangle \le g_{is} \} \qquad (9)$$

7. Якщо $z^s < \bar{z}$, то визначаємо множину індексів $N^n(y^s) \subset Q_s$ і замінюємо Q_s на $Q_s = Q_s \setminus N^n(y^s)$. Покладаємо $\bar{z} = z^s$, $s = s + 1$.

8. Розв'язуємо задачу $Z\left(z, G^s\right)$. Якщо вона не має розв'язків, то не має розв'язків і вхідна задача *MP2*. Інакше одержимо оптимальний розв'язок y^s цієї задачі. Якщо він не є елементом загальної множини перестановок P_{qk}, то переходимо до пункту 9. Інакше вважаючи $Q_S = N_p$ переходимо до пункту 3 алгоритму.

9. Знаходимо суміжні з точкою y^s вершини многогранника перестановок і будуємо відтинання вигляду $\langle h_i, x \rangle \le g_{is}$, яке проходить через суміжні з точкою y^s вершини і якому не задовольняє отримана точка y^s. Формуємо систему обмежень, що описує множину G^{s+1} за формулою (9). Переходимо до пункту 7 алгоритму.

З а у в а ж е н н я. Якщо y^1 – елемент загальної множини перестановок $P_{qk}(A)$, то до множини $N^n(y^1)$ неактивних обмежень, які виключаються

з множини G^s, слід віднести всі обмеження многогранника $P_{nk}(A)$, крім тих, які визначають точку y^1.

Теорема 6. Робота алгоритму закінчується після розв'язання скінченного числа підзадач $Z\left(z, G^s\right)$ і приводить до оптимального розв'язку задачі *MP2* або до побудови такої множини обмежень, при якій поточна підзадача $Z\left(z, G^s\right)$ буде нерозв'язуваною.

Доведення. Оскільки допустима множина G задачі *MP2* скінченна, то вона має скінченне число підмножин. При зменшенні z від одного кроку до іншого жодна підмножина не може повторитися. Оскільки жодне обмеження не відкидається, якщо $z^s = \overline{z}$, і принаймні одне або два обмеження додаються, то значення z^s можуть залишатися постійними лише протягом скінченного числа ітерацій. Отже, за скінченне число кроків алгоритм закінчується.

Досліджена задача частково дискретної оптимізації з урахуванням комбінаторних властивостей області допустимих розв'язків. Досліджені деякі властивості таких задач. Побудовано та обґрунтовано декомпозиційний алгоритм розв'язання указаних задач, заснований на поєднанні ідей методу Бендерса і поліедрального підходу для частково комбінаторних задач. Це дає можливість застосовувати класичні методи неперервної оптимізації до розв'язання частково комбінаторних задач на множині перестановок і на цій основі розвивати нові оригінальні методи розв'язання, використовуючи властивості комбінаторних множин та їх опуклих оболонок.

Список використаних джерел

1. *Сергиенко И.В.* Математические модели и методы решения задач дискретной оптимизации / И.В. Сергиенко.– Киев: Наук. думка, 1988. – 472 с.
2. *Семенова Н.В.* Векторні задачі дискретної оптимізації на комбінаторних множинах: методи дослідження та розв'язання / Н.В. Семенова., Л.М. Колєчкіна. – Киев: Наукова думка, 2009. – 266 с.
3. *Семенова Н.В* Оптимізація на комбінаторній множині перестановок в умовах неточно заданих даних / Н.В. Семенова, О.С. Мащенко // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2009. – №3. – С. 184-189.
4. *Лэсдон Л.С.* Оптимизация больших систем / Л.С. Лэсдон. – Москва: Наука, 1975. – 432 с.
5. *Стоян Ю.Г.* Теорія і методи евклідової комбінаторної оптимізації / Ю.Г. Стоян., О.О. Ємець. – К.: Ін-т систем. досліджень освіти, 1993. –188 с.
6. *Rado R.* An inequality // J. London Math. Soc., 1952, 27.
7. *Емеличев В.А.* Многогранники, графы, оптимизация / В.А. Емеличев, М.М. Ковалев, М.К Кравцов. – М.: Наука, 1981. – 344 с.
8. *Стоян Ю.Г.* Математические модели и оптимизационные методы геометрического проектирования / Ю.Г. Стоян., С.В. Яковлев. – К: Наук. думка, 1986. – 266 с.

References

1. SERGIENKO, I.V. (1988) *Mathematical models and methods for solving discrete optimization problems*. Kyiv: Scientific Idea.
2. SEMENOVA, N.V., KOLECHKINA L.M. (2009) *Vector discrete optimization problems on combinatorial sets: methods and solution.* Kyiv: Scientific Idea.
3. SEMENOVA, N.V., MASHCHENKO, O.S. (2009) Optimization on the combinatorial set of permutations in inexact input data conditions. *Bulletin of University of Kiev. Series: Physics & Mathematics* №3. pp. 184-189.
4. LASDON L. (1975) *Optimization theory for large systems*. New York: MacMillan.
5. STOYAN, Y.G., EMETS O.O (1993) *Theory and methods of Euclidean combinatorial optimization.* Kyiv: Institute for System Studies of Education.
6. RADO R. (1952) An inequality. *J. London Math. Soc.* 27.
7. EMELICHEV, V.A., KOVALYOV, M.M., KRAVTSOV, M.K. (1981) *Polyhedra, graphs, optimization*. Moscow: Nauka.
8. STOYAN, Y.G., YAKOVLEV, S.V. (1989) *Mathematical models and optimization methods for geometric design.* Kyiv: Scientific Idea.

Надійшла до редколегії 05.09.2014

УДК 519.713+530.145

Скобелєв В.Г., д.ф.-м.н., д.т.н., професор

Про структуру множини усіх скінченно-породжуваних напівгруп спеціальних унітарних операторів у просторі $\mathbf{C}^2$.

Інститут прикладної математики і механіки НАН України, 83114, м. Донецьк, вул. Рози Люксембург, 74,
e-mail: skbv@iamm.ac.donetsk.ua

V. G. Skobelev, Dr. (Phys.-Math., Tech.) Sci, Prof.

On the structure of the set of all finitely generated semigroups of special unitary operators in the space $\mathbf{C}^2$.

Institute of Applied Mathematics and Mechanics of NAS of Ukraine, 83114, Rose Luxemburg str., 74,

e-mail: skbv@iamm.ac.donetsk.ua

У статті досліджено структуру множини усіх скінченно породжуваних комутативних напівгруп спеціальних унітарних операторів (термін «спеціальний» означає, що визначник матриці, яка визначає унітарний оператор, дорівнює одиниці) у 2-вимірному комплексному просторі. Охарактеризовано комутативні скінченно породжувані напівгрупи обертів сфери Блоха навколо координатних вісей. У деталях досліджено структуру множини усіх комутативних напівгруп, які породжуються двома елементами. Виділено деякі комутативні моноїди, які породжуються двома елементами.

Ключові слова: унітарні оператори, скінченно породжувані напівгрупи, комутативність.

In the given paper it is investigated the structure of the set of all finitely generated commutative semigroups of special unitary operators (the term «special» means that the determinant of a matrix that defines unitary operator equals to unit) in 2-dimensional complex space. Commutative finitely generated semigroups of rotation of the Bloch sphere around coordinate axes are characterized. Also it is investigated in detail the structure of the set of all commutative semigroups that are generated by two elements. Some commutative monoids generated by two elements are extracted.

Key Words: unitary operators, finitely generated semigroups, commutability.

Статтю представив професор Буй Д.Б.

Introduction

One of basic problem of quantum finite automata (QFA) theory is characteristic of languages accepted by this or the other model of QFA under these or the other restrictions on the model of QFA, as well as on the set of associated unitary operators.

It is well known that there exist different models of QFA intended to recognize languages in the given alphabet (the state of the art for the theory of finite QA is presented in [1]). One of basic restriction on the model of QFA is the number of measurements of its state. Basic models for QFA with measurement of a state at finite instant only are MO-1QFA, L-QFA k QFA $(k \geq 2)$ (see [2-4]) and L-k QFA $(k \geq 2)$ (the last model was introduced in [5] as generalization of the model L-QFA for multi-letter case). These four models in the case of 1-qubit QFA were investigated in [5] under assumption that associated unitary operators are rotations of the Bloch sphere [6] around the y-axe. One of basic restriction on the set of unitary operators associated with QFA is the property "to commute each with the others". Thus, the problem of investigation of the structure of the set of all finitely generated commutative semigroups of unitary operators is actual one for the theory of semigroups, as well as for QFA theory. Unfortunately, this problem is not resolved in general case. Some general characteristics of such semigroups were established in [7].

In the given paper it is investigated the structure of the set of all commutative finitely generated semigroups of special unitary operators $V : \mathbf{C}^2 \to \mathbf{C}^2$ (unitary operator V is special if and only if $\det(V) = 1$).

Remark 1. Our restriction to consider special unitary operators $V : \mathbf{C}^2 \to \mathbf{C}^2$ is justified only by the factor that any unitary operator $U : \mathbf{C}^2 \to \mathbf{C}^2$ can be presented in the form $U = e^{i\delta} V$, where $\delta \in \mathbf{R}$ and $V : \mathbf{C}^2 \to \mathbf{C}^2$ is some special unitary operator.

This case is the simplest non-trivial one for unitary operators, and it is intended to characterize the structure of some important class of languages accepted by 1-qubit QFA.

1. Basic notions

© В.Г Скобелєв, 2014

Let V be the set of all special unitary operators $V:\mathbf{C}^2\to\mathbf{C}^2$, and S be the set of all finitely generated commutative semigroups $\mathsf{G}=(G,\cdot)$, such that $G\subseteq\mathsf{V}$. The semigrop generated by elements $V_1,\ldots,V_k\in\mathsf{V}$ $(k\in\mathbf{N})$ is denoted by $(\langle V_1,\ldots,V_k\rangle,\cdot)$. Without loss of generality in what follows it is suggested that for any semigroup $(\langle V_1,\ldots,V_k\rangle,\cdot)\in\mathsf{S}$ $(k\geq 2)$ the following condition holds

$$(\forall r_1,r_2\in\mathbf{N}_k)(r_1\neq r_2\Rightarrow(\forall n\in\mathbf{N})(V_{r_1}^n\neq V_{r_2}). \quad (1)$$

It is well known (see [6], for example) that any special unitary operator $V\in\mathsf{V}$ can be presented in the form

$$V=\begin{pmatrix} e^{i\alpha}\cos\frac{\gamma}{2} & -e^{-i\beta}\sin\frac{\gamma}{2} \\ e^{-i\beta}\sin\frac{\gamma}{2} & e^{-i\alpha}\cos\frac{\gamma}{2}\end{pmatrix}\quad(\alpha,\beta,\gamma\in\mathbf{R}). \quad (2)$$

Thus without loss of generality we can assume in what follows that V is the set of all unitary operators V defined by identity (2), such that $\alpha,\beta\in[0,2\pi)$ and $\gamma\in[0,4\pi)$.

Important special unitary operators $U:\mathbf{C}^2\to\mathbf{C}^2$ are $R_\gamma^{(1)}$, $R_\gamma^{(2)}$ and $R_\gamma^{(3)}$ are defined by formulae

$$R_\gamma^{(1)}=\begin{pmatrix}\cos 0.5\frac{\gamma}{2} & -i\sin 0.5\frac{\gamma}{2}\\ i\sin 0.5\frac{\gamma}{2} & \cos 0.5\frac{\gamma}{2}\end{pmatrix},$$

$$R_\gamma^{(2)}=\begin{pmatrix}\cos 0.5\frac{\gamma}{2} & -\sin 0.5\frac{\gamma}{2}\\ \sin 0.5\frac{\gamma}{2} & \cos 0.5\frac{\gamma}{2}\end{pmatrix},$$

$$R_\gamma^{(3)}=\begin{pmatrix}e^{-i\frac{\gamma}{2}} & 0\\ 0 & e^{i\frac{\gamma}{2}}\end{pmatrix}.$$

Unitary operators $R_\gamma^{(1)}$, $R_\gamma^{(2)}$ and $R_\gamma^{(3)}$ are rotations of the Bloch sphere through the angle $\frac{\gamma}{2}$ around, correspondingly, the x-axe, the y-axe and the z-axe. It is well known that any special unitary operator $V:\mathbf{C}^2\to\mathbf{C}^2$ can be presented as superposition $V=R_{\gamma_1}^{(3)}R_{\gamma_2}^{(2)}R_{\gamma_3}^{(3)}$.

2. The structure of the set S

Let

$$\mathsf{S}_1=\{(\langle V\rangle,\cdot)\,|\,V\in\mathsf{V}\}.$$

It is evident that the following lemma holds.

Lemma 1. The set S_1 consists of all commutative cyclic semigroups.

Let

$$\mathsf{V}^{(l)}=\{R_\gamma^{(l)}\,|\,\gamma\in[0,4\pi)\}\quad(l=1,2,3).$$

Setting

$$\mathsf{S}_1^{(l)}=\{(\langle V\rangle,\cdot)\,|\,V\in\mathsf{V}^{(l)}\}\quad(l=1,2,3),$$

we extract in the set S_1 the sets of all commutative cyclic semigroups of rotation of the Bloch sphere through fixed angle around fixed coordinate axe.

Since for any $\gamma_1,\gamma_2\in[0,4\pi)$ holds identity

$$R_{\gamma_1}^{(l)}R_{\gamma_2}^{(l)}=R_{\gamma_2}^{(l)}R_{\gamma_1}^{(l)}=R_{(\gamma_1+\gamma_2)(\mathrm{mod}\,4\pi)}^{(l)}\quad(l=1,2,3), \quad (3)$$

then $(\langle R_\gamma^{(l)}\rangle,\cdot)\in\mathsf{S}_1^{(l)}$ $(\gamma\in[0,4\pi),l=1,2,3)$ is finite semigroup if and only if $\gamma(\mathrm{mod}\,\pi)\in\mathbf{Q}_+$.

Identity (3) implies that it can be extracted the following important subset of the set of all finitely generated commutative non-cyclic semigroups $(\langle V_1,\ldots,V_k\rangle,\cdot)\in\mathsf{S}$ $(k\geq 2)$.

For all $k\geq 2$ $(k\in\mathbf{N})$ we set

$$\mathsf{S}_{2l}^{(k)}=(\langle R_{\gamma_1}^{(l)},\ldots,R_{\gamma_k}^{(l)}\rangle,\cdot)\,|\,R_{\gamma_1}^{(l)},\ldots,R_{\gamma_k}^{(l)}\in\mathsf{V}^{(l)}\ \&$$
$$\&\ (\forall r_1,r_2\in\mathbf{N}_k)(\forall n\in\mathbf{N})(r_1\neq r_2\Rightarrow$$
$$\Rightarrow(R_{\gamma_{r_1}}^{(l)})^n\neq R_{\gamma_{r_2}}^{(l)})\}\quad(l=1,2,3).$$

It is evident that for any two fixed numbers $\gamma_{r_1},\gamma_{r_2}\in[0,4\pi)$ $(\gamma_{r_1}\neq\gamma_{r_2})$ and any integer $l\in\mathbf{N}_3$ identity $(R_{\gamma_1}^{(l)})^n=R_{\gamma_2}^{(l)}$ holds for some integer $n\in\mathbf{N}$ if and only if $n\gamma_{r_1}-\gamma_{r_2}\equiv 0(\mathrm{mod}\,4\pi)$.

Let

$$\mathsf{S}_{2l}=\bigcup_{k=2}^{\infty}\mathsf{S}_{2l}^{(k)}\quad(l=1,2,3),$$

and

$$\mathsf{S}_2=\bigcup_{l=1}^{3}\mathsf{S}_{2l}.$$

Thus, the following lemma holds.

Lemma 2. The set S_2 consists of all finitely generated commutative non-cyclic semigroups of rotation of the Bloch sphere around fixed coordinate axe.

It is evident that any commutative semigroup $(\langle R_{\gamma_1}^{(j)},\ldots,R_{\gamma_k}^{(j)}\rangle,\cdot)\in\mathsf{S}_{2j}^{(k)}$ (where $k\in\mathbf{N}$ $(k\geq 2)$ and $j=1,2,3$) is finite one if and only if $\gamma_r(\mathrm{mod}\,\pi)\in\mathbf{Q}$ for all integers $r\in\mathbf{N}_k$.

Now we investigate the structure of the set of all finitely generated non-cyclic commutative semigroups $(\langle V_1,\ldots,V_k\rangle,\cdot)\in\mathsf{S}$ $(k\geq 2)$.

To achieve our aim it is sufficient to investigate conditions under which commute two different special unitary operators

$$V_j = \begin{pmatrix} e^{i\alpha_j}\cos\frac{\gamma_j}{2} & -e^{-i\beta_j}\sin\frac{\gamma_j}{2} \\ e^{i\beta_j}\sin\frac{\gamma_j}{2} & e^{-i\alpha_j}\cos\frac{\gamma_j}{2} \end{pmatrix} \in \mathcal{V} \quad (j=1,2), \quad (4)$$

such that $\alpha_j, \beta_j \in [0,2\pi)$ $(j=1,2)$ and $\gamma_j \in [0,4\pi)$ $(j=1,2)$.

Remark 2. We would set these or the others restrictions on the structure of special unitary operator V_1 and determine corresponding restrictions on the structure of special unitary operator V_2.

Formula (4) implies that

$$V_1V_2 = V_2V_1 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} (e^{i(-\beta_1+\beta_2)} - e^{i(-\beta_2+\beta_1)})\sin\frac{\gamma_1}{2}\sin\frac{\gamma_2}{2} = 0 \\ e^{i\beta_1}(e^{i\alpha_1} - e^{-i\alpha_1})\sin\frac{\gamma_2}{2}\cos\frac{\gamma_1}{2} = \\ \qquad = e^{i\beta_2}(e^{i\alpha_2} - e^{-i\alpha_2})\sin\frac{\gamma_1}{2}\cos\frac{\gamma_2}{2} \end{cases} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} (e^{i2(-\beta_1+\beta_2)} - 1)\sin\frac{\gamma_1}{2}\sin\frac{\gamma_2}{2} = 0 \\ e^{i\beta_1}\sin\alpha_1\sin\frac{\gamma_2}{2}\cos\frac{\gamma_1}{2} = \\ \qquad = e^{i\beta_2}\sin\alpha_2\sin\frac{\gamma_1}{2}\cos\frac{\gamma_2}{2} \end{cases}. \quad (5)$$

The first identity in (5) implies that we can analyze the following cases.

Case 1. Let

$$\sin\frac{\gamma_1}{2} = 0 \quad (\gamma_1 \in [0,4\pi)).$$

Thus, $\gamma_1 \in \{0,2\pi\}$.

Setting $\sin\frac{\gamma_1}{2} = 0$ and $\cos\frac{\gamma_1}{2} = \pm 1$ in (4) we get that $V_1 \in \mathcal{V}_1(\alpha_1)$, where

$$\mathcal{V}_1(\alpha) = \{\widetilde{R}^{(3)}_\alpha, -\widetilde{R}^{(3)}_\alpha\} \quad (\alpha \in [0,2\pi)), \quad (6)$$

and

$$\widetilde{R}^{(3)}_\alpha = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \quad (\alpha \in [0,2\pi)).$$

It is evident that special unitary operator $\widetilde{R}^{(3)}_\alpha$ $(\alpha \in [0,2\pi))$ is rotation of the Bloch sphere through the angle $-\alpha$ around the z-axe.

Thus, identity

$$\widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_1}\widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_2} = \widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_2}\widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_1} = \widetilde{R}^{(3)}_{(\alpha_1+\alpha_2)(\mathrm{mod}\,2\pi)}$$

holds for any $\alpha_1, \alpha_2 \in [0,2\pi)$.

The second identity in (5) takes the form

$$\sin\alpha_1\sin\frac{\gamma_2}{2} = 0 \quad (\alpha_1 \in [0,2\pi), \gamma_2 \in [0,4\pi)). \quad (7)$$

The following cases can take the place.

Case 1.1. Let

$$\sin\frac{\gamma_2}{2} = 0 \quad (\gamma_2 \in [0,4\pi)).$$

Thus, $\gamma_2 \in \{0,2\pi\}$.

Setting $\sin\frac{\gamma_2}{2} = 0$ and $\cos\frac{\gamma_2}{2} = \pm 1$ in (4) we get that that $V_2 \in \mathcal{V}_1(\alpha_2)$.

Let

$$\mathsf{S}_3 = \bigcup_{k=2}^{\infty}\mathsf{S}_3^{(k)},$$

where

$$\mathsf{S}_3^{(k)} = (\langle V_1,\ldots,V_k\rangle,\cdot) \,|\, V_1,\ldots,V_k \in \bigcup_{\omega\in[0,2\pi)}\mathcal{V}_1(\omega)\ \&$$

$$\&\ (\forall r_1, r_2 \in \mathbf{N}_k)(\forall n \in \mathbf{N})(r_1 \neq r_2 \Rightarrow V_{r_1}^n \neq V_{r_2})\}.$$

It is evident that for any two fixed numbers $\alpha_{r_1}, \alpha_{r_2} \in [0,2\pi)$:

1) if $V_{r_1} = \widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_{r_1}}$ and $V_{r_2} = \widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_{r_2}}$, or $V_{r_1} = -\widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_{r_1}}$ and $V_{r_2} = -\widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_{r_2}}$ then identity $V_{r_1}^n = V_{r_2}$ holds for some integer $n \in \mathbf{N}$ if and only if relation $n\alpha_{r_1} - \alpha_{r_2} \equiv 0\,(\mathrm{mod}\,2\pi)$ holds;

2) if $V_{r_1} = \widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_{r_1}}$ and $V_{r_2} = -\widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_{r_2}}$, then identity $V_{r_1}^n = V_{r_2}$ holds for some integer $n \in \mathbf{N}$ if and only if $\pi^{-1}(n\alpha_{r_1} - \alpha_{r_2})$ is odd integer;

3) if $V_{r_1} = -\widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_{r_1}}$ and $V_{r_2} = \widetilde{R}^{(3)}_{\alpha_{r_2}}$, then identity $V_{r_1}^n = V_{r_2}$ holds for some integer $n \in \mathbf{N}$ if and only if either n and $\pi^{-1}(n\alpha_{r_1} - \alpha_{r_2})$ are odd integers, or n is even integer and relation $n\alpha_{r_1} - \alpha_{r_2} \equiv 0\,(\mathrm{mod}\,2\pi)$ holds.

Thus, the following lemma holds.

Lemma 3. The set S_3 consists of finitely generated non-cyclic commutative semigroups.

It is evident that it holds inclusion

$$\mathsf{S}_3 \subset \mathsf{S}_{23}^{(2)}.$$

Case 1.2. Let

$$\sin\frac{\gamma_2}{2} \neq 0 \quad (\gamma_2 \in [0,4\pi)).$$

Thus, $\gamma_2 \in [0,4\pi) \setminus \{0,2\pi\}$.

Identity (7) takes the form

$$\sin\alpha_1 = 0 \quad (\alpha_1 \in [0,2\pi)).$$

Thus, $\alpha_1 \in \{0,\pi\}$ and identity (6) takes the form $V_1 \in \{I,-I\}$, where I is the unit 2×2-matrix.

Let

$$\mathsf{V}_2 = \{I,-I\}$$

and V_3 be the set of all special unitary operators $V \in \mathsf{V}$ defined by formula (1), such that $\gamma \in [0,4\pi) \setminus \{0,2\pi\}$ and $V^n \notin \mathsf{V}_2$ for all $n \in \mathbf{N}$.

We set

$$\mathsf{S}_4 = \{(\langle V_1, V_2\rangle,\cdot)\} \mid V_1 \in \mathsf{V}_2, V_2 \in \mathsf{V}_3\}.$$

Thus, the following lemma holds.

Lemma 4. The set S_4 consists of finitely generated non-cyclic commutative semigroups.

Remark 3. It is evident that if in the case 1 we set $\sin\frac{\gamma_2}{2}=0 \quad (\gamma_2 \in [0,4\pi))$ instead of $\sin\frac{\gamma_1}{2}=0$ $(\gamma_1 \in [0,4\pi))$, we get the same lemmas 2,3 and 4.

Case 2. Let

$$\begin{cases} \sin\frac{\gamma_1}{2} \neq 0 \ (\gamma_1 \in [0,4\pi)) \\ \sin\frac{\gamma_2}{2} \neq 0 \ (\gamma_2 \in [0,4\pi)) \end{cases}. \qquad (8)$$

Thus, $\gamma_j \in [0,4\pi) \setminus \{0,2\pi\} \ (j=1,2)$.

The first identity in (5) takes the form

$$e^{i2(-\beta_1+\beta_2)} = 1 \quad (\beta_1,\beta_2 \in [0,2\pi)). \qquad (9)$$

Without loss of generality we can assume that it holds inequality $\beta_1 \le \beta_2$ (since if $\beta_2 < \beta_1$ we can set $V_1 := V_2$ and $V_2 := V_1$).

Since $\beta_j \in [0,2\pi)$ and $\beta_1 \le \beta_2$ then identity (9) implies that either $\beta_2 = \beta_1$, or $\beta_2 = \beta_1 + \pi$.

Formula (4) implies that:

1) if $\beta_2 = \beta_1$ then

$$V_j = \begin{pmatrix} e^{i\alpha_j}\cos\frac{\gamma_j}{2} & -e^{-i\beta_1}\sin\frac{\gamma_j}{2} \\ e^{i\beta_1}\sin\frac{\gamma_j}{2} & e^{-i\alpha_j}\cos\frac{\gamma_j}{2} \end{pmatrix} \ (j=1,2); \qquad (10)$$

2) if $\beta_2 = \beta_1 + \pi$ then

$$V_1 = \begin{pmatrix} e^{i\alpha_1}\cos\frac{\gamma_1}{2} & -e^{-i\beta_1}\sin\frac{\gamma_1}{2} \\ e^{i\beta_1}\sin\frac{\gamma_1}{2} & e^{-i\alpha_1}\cos\frac{\gamma_1}{2} \end{pmatrix}, \qquad (11)$$

$$V_2 = \begin{pmatrix} e^{i\alpha_2}\cos\frac{\gamma_2}{2} & e^{-i\beta_1}\sin\frac{\gamma_2}{2} \\ -e^{i\beta_1}\sin\frac{\gamma_2}{2} & e^{-i\alpha_2}\cos\frac{\gamma_2}{2} \end{pmatrix}. \qquad (12)$$

The second identity in (5) takes the form

$$\sin\alpha_1 \sin\frac{\gamma_2}{2}\cos\frac{\gamma_1}{2} = \pm\sin\alpha_2 \sin\frac{\gamma_1}{2}\cos\frac{\gamma_2}{2}, \qquad (13)$$

where $\gamma_1,\gamma_2 \in [0,4\pi) \setminus \{0,2\pi\}$.

The following cases can take the place.

Case 2.1. Let

$$\cos\frac{\gamma_1}{2} = 0 \quad (\gamma_1 \in [0,4\pi) \setminus \{0,2\pi\}).$$

Thus, $\gamma_1 \in \{\pi,3\pi\}$.

Since $\cos\frac{\gamma_1}{2}=0$ and $\sin\frac{\gamma_1}{2}=\pm 1$ then formulae (10) and (11) imply that $V_1 \in \mathsf{V}_4(\beta_1)$, where the set $\mathsf{V}_4(\beta)$ $(\beta \in [0,2\pi))$ is defined by identity

$$\mathsf{V}_4(\beta) = \{J_\beta, -J_\beta\} \quad (\beta \in [0,2\pi)), \qquad (14)$$

and

$$J_\beta = \begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\beta} \\ e^{i\beta} & 0 \end{pmatrix} \ (\beta \in [0,2\pi)).$$

Identity (13) takes the form

$$\sin\alpha_2 \cos\frac{\gamma_2}{2} = 0, \qquad (15)$$

where $\gamma_2 \in [0,4\pi) \setminus \{0,2\pi\}$ and $\alpha_2 \in [0,2\pi)$.

The following cases can take the place.

Case 2.1.1. Let

$$\cos\frac{\gamma_2}{2} = 0 \quad (\gamma_2 \in [0,4\pi) \setminus \{0,2\pi\}).$$

Thus, $\gamma_2 \in \{\pi,3\pi\}$.

Since $\cos\frac{\gamma_2}{2}=0$ and $\sin\frac{\gamma_2}{2}=\pm 1$, we get that $V_2 \in \mathsf{V}_4(\beta_1)$.

Disequality $V_2 \neq V_1$ and formulae (14) imply that it holds identity $V_2 = -V_1$, where $V_1 \in \mathsf{V}_4(\beta_1)$.

Let

$$\mathsf{S}_4 = \{(\langle V,-V\rangle,\cdot) \mid V \in \bigcup_{\beta\in[0,2\pi)} \mathsf{V}_4(\beta)\}.$$

Since for any number $\beta \in [0,2\pi)$ holds identity $J_\beta^2 = -I \ (\beta \in [0,2\pi))$, the following lemma holds.

Lemma 5. The set S_4 consists of finite finitely generated non-cyclic commutative semigroups.

Case 2.1.2. Let $\cos\frac{\gamma_2}{2} \neq 0 \ (\gamma_2 \in [0,4\pi))$.

Thus, $\gamma_2 \in [0,4\pi) \setminus \{0,\pi,2\pi,3\pi\}$.

Identity (15) takes the form

$$\sin\alpha_2 = 0 \quad (\alpha_2 \in [0,2\pi)).$$

Thus, $\alpha_2 \in \{0,\pi\}$.

Since $e^{i\alpha_2} = \pm 1$ then identities (10) and (11) imply that $V_2 \in \mathsf{V}_5(\beta_1)$, where the set $\mathsf{V}_5(\beta)$ $(\beta \in [0,2\pi))$ is determined by identity

$$V_5(\beta)=\bigcup_{\gamma\in[0,4\pi)\setminus\{0,\pi,2\pi,3\pi\}} V_5(\gamma,\beta) \quad (\beta\in[0,2\pi)),$$

where

$$V_5(\gamma,\beta)=\{U_j(\gamma,\beta)\mid j=1,\ldots,4\},$$

and

$$U_1(\gamma,\beta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\gamma}{2} & -e^{-i\beta}\sin\frac{\gamma}{2}\\ e^{i\beta}\sin\frac{\gamma}{2} & \cos\frac{\gamma}{2}\end{pmatrix},$$

$$U_2(\gamma,\beta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\gamma}{2} & e^{-i\beta}\sin\frac{\gamma}{2}\\ -e^{i\beta}\sin\frac{\gamma}{2} & \cos\frac{\gamma}{2}\end{pmatrix},$$

$$U_3(\gamma,\beta)=-U_2(\gamma,\beta),$$

$$U_4(\gamma,\beta)=-U_1(\gamma,\beta).$$

It is evident that:

1) if $\beta=0$ then $U_1(\gamma,\beta)$ is rotation of the Bloch sphere through the angle $\frac{\gamma}{2}$ around the y-axe;

2) if $\beta=\frac{3\pi}{2}$ then $U_2(\gamma,\beta)$ is rotation of the Bloch sphere through the angle $\frac{\gamma}{2}$ around the x-axe.

Let

$$\mathsf{S}_5=\bigcup_{\beta\in[0,2\pi)}\ \bigcup_{\gamma\in[0,4\pi)\setminus\{0,\pi,2\pi,3\pi\}} \mathsf{S}_5(\gamma,\beta),$$

where

$$\mathsf{S}_5(\gamma,\beta)=\{\langle V_1,V_2\rangle\mid V_1\in V_4(\beta)\ \&$$

$$\&\ V_2\in V_5(\gamma,\beta)\ \&\ (\forall n\in\mathbf{N})(V_2^n\neq V_1)\}.$$

Thus, the following lemma holds.

Lemma 6. The set S_5 consists of finitely generated non-cyclic commutative semigroups.

Remark 4. It is evident that if in the case 2.1 we set $\cos\frac{\gamma_2}{2}=0 \quad (\gamma_2\in[0,4\pi)\setminus\{0,2\pi\})$ instead of $\cos\frac{\gamma_1}{2}=0 \quad (\gamma_1\in[0,4\pi)\setminus\{0,2\pi\})$, we get the same lemmas 5 and 6.

Case 2.2. Let

$$\begin{cases}\cos\frac{\gamma_1}{2}\neq 0 \ (\gamma_1\in[0,4\pi))\\ \cos\frac{\gamma_2}{2}\neq 0 \ (\gamma_2\in[0,4\pi))\end{cases}. \qquad (16)$$

Thus, we get that $\gamma_1,\gamma_2\in[0,4\pi)\setminus\{0,\pi,2\pi,3\pi\}$.

The following cases can take the place.

Case 2.2.1. Let

$$\sin\alpha_1=0 \quad (\alpha_1\in[0,2\pi)).$$

Thus, we get that $\alpha_1\in\{0,\pi\}$.

Identity (13) takes the form

$$\sin\alpha_2=0 \quad (\alpha_2\in[0,2\pi)).$$

Thus, we get that $\alpha_2\in\{0,\pi\}$.

Formulae (10)-(12) imply that:

1) if $\beta_2=\beta_1$ then

$$V_j=\begin{pmatrix}\pm\cos\frac{\gamma_j}{2} & -e^{-i\beta_1}\sin\frac{\gamma_j}{2}\\ e^{i\beta_1}\sin\frac{\gamma_j}{2} & \pm\cos\frac{\gamma_j}{2}\end{pmatrix} \quad (j=1,2); \qquad (17)$$

2) if $\beta_2=\beta_1+\pi$ then

$$V_1=\begin{pmatrix}\pm\cos\frac{\gamma_1}{2} & -e^{-i\beta_1}\sin\frac{\gamma_1}{2}\\ e^{i\beta_1}\sin\frac{\gamma_1}{2} & \pm\cos\frac{\gamma_1}{2}\end{pmatrix}, \qquad (18)$$

$$V_2=\begin{pmatrix}\pm\cos\frac{\gamma_2}{2} & e^{-i\beta_1}\sin\frac{\gamma_2}{2}\\ -e^{i\beta_1}\sin\frac{\gamma_2}{2} & \pm\cos\frac{\gamma_2}{2}\end{pmatrix}. \qquad (19)$$

Formulae (17)-(19) imply that $V_2\in V_5(\gamma_2,\beta_1)$ and $V_1\in V_6(\gamma_1,\beta_1)$, where the set $V_6(\gamma,\beta)$ is defined by identity

$$V_6(\gamma,\beta)=\{U_1(\gamma,\beta),U_3(\gamma,\beta,)\}.$$

Let

$$\mathsf{S}_6=\bigcup_{\beta\in[0,2\pi)}\mathsf{S}_6(\beta),$$

where

$$\mathsf{S}_6(\beta)=\bigcup_{\gamma_1,\gamma_2\in[0,4\pi)\setminus\{0,\pi,2\pi,3\pi\}}\{\langle V_1,V_2\rangle\mid V_1\in V_6(\gamma_1,\beta)\ \&$$

$$\&\ V_2\in\mathsf{V}_5(\gamma_2,\beta)\ \&\ (\forall n\in\mathbf{N})(V_1^n\neq V_2\ \&\ V_2^n\neq V_1)\},$$

Thus, the following lemma holds.

Lemma 7. The set S_6 consists of finitely generated non-cyclic commutative semigroups.

Remark 5. It is evident that if in the case 2.2.1 we set $\sin\alpha_2=0 \quad (\alpha_2\in[0,2\pi))$ instead of setting $\sin\alpha_1=0 \quad (\alpha_1\in[0,2\pi))$, we get the same lemma 7.

Case 2.2.2. Let

$$\begin{cases}\sin\alpha_1\neq 0 \ (\alpha_1\in[0,2\pi))\\ \sin\alpha_2\neq 0 \ (\alpha_2\in[0,2\pi))\end{cases}.$$

Thus, $\alpha_1,\alpha_2\in[0,2\pi)\setminus\{0,\pi\}$.

Identity (13) takes the form

$$\frac{\sin\alpha_1}{\sin\alpha_2}=\pm tg\frac{\gamma_1}{2}\,ctg\frac{\gamma_2}{2}, \qquad (19)$$

under conditions that $\gamma_1,\gamma_2\in[0,4\pi)\setminus\{0,\pi,2\pi,3\pi\}$ and $\alpha_1,\alpha_2\in[0,2\pi)\setminus\{0,\pi\}$.

Let $S'(\beta_1)$ be the set of all unordered pairs $\{V_1, V_2\}$ of special unitary operators, such that the following three conditions hold:

1) unitary operators V_j $(j=1,2)$ are defined by formula (10), where $\gamma_1, \gamma_2 \in [0,4\pi) \setminus \{0, \pi, 2\pi, 3\pi\}$ and $\alpha_1, \alpha_2 \in [0,2\pi) \setminus \{0, \pi\}$;

2) identity $\frac{\sin\alpha_1}{\sin\alpha_2} = tg\frac{\gamma_1}{2} ctg\frac{\gamma_2}{2}$ holds;

3) disequalities $V_1^n \neq V_2$ $(n \in \mathbf{N})$ and $V_2^n \neq V_1$ $(n \in \mathbf{N})$ hold.

Similarly, let $S''(\beta_1)$ be the set of all ordered pairs (V_1, V_2) of special unitary operators, such that the following three conditions hold:

1) unitary operators V_1 is defined by formula (10) and unitary operators V_2 is defined by formula (12), under supposition that $\gamma_1, \gamma_2 \in [0,4\pi) \setminus \{0, \pi, 2\pi, 3\pi\}$ and $\alpha_1, \alpha_2 \in [0,2\pi) \setminus \{0, \pi\}$;

2) identity $\frac{\sin\alpha_1}{\sin\alpha_2} = -tg\frac{\gamma_1}{2} ctg\frac{\gamma_2}{2}$ holds;

3) disequalities $V_1^n \neq V_2$ $(n \in \mathbf{N})$ and $V_2^n \neq V_1$ $(n \in \mathbf{N})$ hold.

Let

$$\mathsf{S}_7 = \bigcup_{\beta_1 \in [0,2\pi)} \{\langle V_1, V_2 \rangle \mid \{V_1, V_2\} \in S'(\beta_1)\} \cup \cup \bigcup_{\beta_1 \in [0,2\pi)} \{\langle V_1, V_2 \rangle \mid (V_1, V_2) \in S''(\beta_1)\}.$$

Thus, the following lemma holds.

Lemma 8. The set S_7 consists of finitely generated non-cyclic commutative semigroups.

Lemmas 1-8 and inclusion $\mathsf{S}_3 \subset \mathsf{S}_{23}^{(2)}$ imply that the following theorem holds.

Theorem. It holds inclusion $\mathsf{S} \supseteq \bigcup_{\substack{j=1 \\ j \neq 3}}^{7} \mathsf{S}_j$.

Conclusions

In the given paper the structure of the set of all commutative finitely generated semigroups of special unitary operators $V : \mathbf{C}^2 \to \mathbf{C}^2$ is investigated. Obtained results form strong base for investigation of subclasses of languages accepted by models of 1-qubit QFA with measurement of a state at finite instant only.

Solving the problem "$\mathsf{S} = \bigcup_{\substack{j=1 \\ j \neq 3}}^{7} \mathsf{S}_j$?" forms some possible trend for future research. Analysis in detail the structure of the subset of all finite (also of all infinite) semigroups $\mathsf{G} \in \mathsf{S}$. Characterization the structure of the subset of all monoids $\mathsf{G} \in \mathsf{S}$, as well as of the set of all groups $\mathsf{G} \in \mathsf{S}$ determines the third trend for future research.

Список використаних джерел

1. *Skobelev V.G.* Theory of finite quantum automata (a survey) // Tr. Inst. Prikl. Math. Mech. of NAS of Ukraine – 2012. – Vol. 25. – P. 196-209

2. *Moore C.*, *Crutchfield J.* Quantum automata and quantum grammars // Theor. Comput. Sci. – 2000. – Vol. 237. – P. 257-306.

3. *Ambainis A.*, *Beaudry M.*, *Golovkins M.*, *at all.* Algebraic results on quantum automata // LNCS. – 2004. – Vol. 2996. – P. 93-104.

4. *Belovs A.*, *Rosmanis A.*, *Smotrovs J.* Multi-letter reversible and quantum finite automata // LNCS. – 2007. – Vol. 4588. – P. 60-71.

5. *Skobelev V.G.* Analysis of finite 1-qubit quantum automata unitary operators of which are rotations // Visn., Ser. Fiz.-Mat. Nayky, Ky\"iv Univ. im. Tarasa Shevchenka. – 2014. – N 2. – P. 234-238.

6. *Williams C.P.* Explorations in quantum computing. – London: Springer Verlag, 2011. – 717 p.

7. *Skobelev V.G.* Quantum automata with operators that commute // Visn., Ser. Fiz.-Mat. Nayky, Kyiv Univ. im. Tarasa Shevchenka. – 2013. – Special issue. – P. 34-41.

References

1. SKOBELEV, V.G. (2012) Theory of finite quantum automata (a survey). *Tr. Inst. Prikl. Math. Mech. of NAS of Ukraine*. 25. pp. 196-209.

2. *MOORE C.*, *CRUTCHFIELD J.* (2000) Quantum automata and quantum grammars. *Theor. Comput. Sci.* 237., pp. 257-306.

3. *AMBAINIS A.*, *BEAUDRY M.*, *GOLOVKINS M.*, *at all*. (2004) Algebraic results on quantum automata, LNCS. 2996, pp. 93-104.

4. *BELOVS A.*, *ROSMANIS A.*, *SMOTROVS J.* (2007) Multi-letter reversible and quantum finite automata. LNCS. 4588, pp. 60-71.

5. *SKOBELEV V.G. (2014)* Analysis of finite 1-qubit quantum automata unitary operators of which are rotations. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physics & Mathematics.* 2, pp. 234-238.

6. *WILLIAMS C.P.* (2011) Explorations in quantum computing. – London: Springer Verlag..

7. *SKOBELEV V.G.* (2013) Quantum automata with operators that commute *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physics & Mathematics.* Special issue. – pp. 34-41.

Надійшла до редколегії 29.05.14

УДК 709.4; 710.5

Тмєнова Н.П.[1], к.ф.-м.н.,
Сусь Б.Б.[2], к.ф.-м.н.

Алгоритм комп'ютерного тестування математичних завдань в віртуальних начальних середовищах

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка,03680, м. Київ, пр-т Глушкова 4д, e-mail: lysak@unicyb.kiev.ua

[2] Київський національний університет імені Тараса Шевченка,03680, м. Київ, пр-т Глушкова 4г, e-mail: bnsuse@gmail.com

N.P. Tmyenova[1], PhD,
B.B. Suse[2], PhD.

Computer-based testing algorithm of mathematical expressions in virtual e-learning systems

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova av., 4d,
e-mail: lysak@unicyb.kiev.ua

[2] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova av., 4g,
e-mail: bnsuse@gmail.com

Пропонується методика перевірки завдань з математичних дисциплін під час проведення тестування в електронних навчальних середовищах. Розроблено алгоритм компонентного аналізу формульних виразів та їх індексування для автоматичної обробки. Запропонований підхід дає можливість урізноманітнити типи тестових запитань та реалізувати їх перевірку в комп'ютерних системах.

Ключові слова: автоматичний аналіз, тестування, формульні вирази.

According to the Bologna process a significant time of students' learning activities focused on independent work. Independent learning activities require proper organization and didactic support. E-Learning environments can simplify the process and widely used in the independent learning. Despite the problems of obtaining educational information in e-learning were successfully resolved, the testing of obtained knowledge still requires a solution. Principles of knowledge examination of mathematical subject testing in e-learning environments have been developed. Component analysis and formula expression indexing algorithm for automatic analysis is suggested. This approach allows to diversify the types of questions for consequent verification and implementation in computer systems. Modification of the formula editor provides the creation of templates for entering formulae and indexing algorithm using elements of expression that allows to avoid ambiguity with the interpretation of student answers. The tasks of verifying the analytical computer symbolic expression can be used for automation of the verification of test answers of the natural sciences through appropriate modification of the template.

Key Words: automatic analysis, testing, formula expressions.

Вступ

З урахуванням позицій Болонського процесу значна частина навчальної діяльності студентів орієнтована на самостійну роботу. Самостійна діяльність студентів потребує відповідної організації і дидактичного забезпечення. Електронні навчальні середовища (ЕНС) значно спрощують цей процес, тому останнім часом почали широко використовуватися в навчальному процесу.

Якщо проблеми отримання навчальної інформації при електронному навчанні успішно вирішуються, то перевірка засвоєного матеріалу залишається актуальною проблемою. Серед способів проведення тестування можна виділити як найбільш вживані паперовий та комп'ютерний. При паперовому способі тестування студенти отримують аркуші паперу, на яких надруковані тестові завдання, знаходять правильні відповіді й відмічають їх позначками. Більшість паперових тестів розроблені так, що перегляд аркушів, перевірка правильності відповідей та підрахунок кількості набраних балів може виконуватись комп'ютерними засобами. При комп'ютерному тестуванні студент взаємодіє тільки з комп'ютером, а контролюючий викладач практично відсторонений як від роздавання завдань, так і від оцінювання їх виконання. Вважається, що завдяки суб'єктивізму комп'ютерне тестування є

© Н.П. Тмєнова, Б.Б. Сусь, 2014

найбільш об'єктивним та технологічним засобом оцінювання знань. ЕНС мають функцію тестування знань, але, як показує практика, її можливості досить обмежені і мають ряд недоліків. Практично в усіх навчальних системах існують стандартні форми тестових завдань. Найбільш поширеними при комп'ютерному тестуванні знань є форми тестових завдань закритого типу: множинний вибір (multiple choice), вибір правильної відповіді (відповідей) з декількох, та питання на відповідність [1].

Тестування знань з математичних дисциплін

Засоби комп'ютерного тестування можуть значно полегшити монотонну перевірку розв'язків великої кількості математичних прикладів при роботі з широкою аудиторією студентів [2]. Але при тестуванні знань з природничих наук форм закритого типу виявляється недостатньо, оскільки вони не передбачають перевірки цілого ряду завдань, які в якості кінцевого результату мають формульний вираз. Більш того, в ряді випадків при використанні питань закритого типу правильну відповідь досить легко знайти шляхом підстановки варіантів відповідей в умову задачі.

За цільовим призначенням тестування тестові завдання можна розділити на теоретичні (перевірка знань) та практичні (перевірка вмінь та навичок).

Якість тестового іспиту залежить від упорядкування тестових завдань, їх глибини і повноти охоплення матеріалу, що підлягає контролю. За допомогою правильно складених тестів можна оцінювати не тільки уміння відтворювати певну інформацію, але також зіставляти, аналізувати та інтерпретувати факти.

При визначенні рівня підготовки студентів з математичних дисциплін основна увага приділяється перевірці вмінь та навичок. Основним типом запитань при цьому є завдання, відповідь на які задається у вигляді формули. Також при використанні запитань відкритого типу виникає проблема неоднозначності форм представлення відповідей, кожна з яких є правильною.

Особливістю більшості ЕНС (наприклад, Moodle) та візуальних редакторів формульних виразів є те, що вони написані на основі відкритого коду, тому їх досить легко модифікувати [3]. Це можна зробити власними силами навчального закладу. Більш того, до виконання таких проектів можна залучити студентів, що володіють відповідними навичками програмування.

У запропонованому підході модифікація редактора формул передбачає створення шаблонів для введення формул та використання індексації елементів виразу [4]. Вікно введення формул зображено на рисунку 1.

Алгоритм перевірки даних (володіння матеріалом) дає можливість здійснювати перевірку знань і у випадку неоднозначності при введенні відповіді студентами. Основними етапами роботи алгоритму є виконання таких кроків, як індексування елементів масиву по групах, перевірка комутативних, асоціативних та дистрибутивних операцій. Запропонований алгоритм передбачає формалізацію введеного матеріалу, тобто представлення елементів формульного виразу у структурованому, придатному для комп'ютерного опрацювання вигляді, для подальшої обробки та порівняння з еталонним значенням (із використанням імовірнісного підходу до оцінки рівня знань студента).

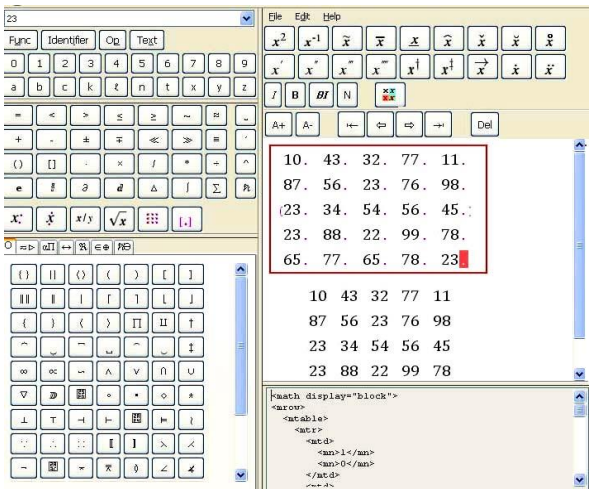


Рис. 1. Вікно введення формул

Роботу алгоритму перевірки даних можна зобразити у вигляді розгорнутої схеми, що зображена на рисунку 2.

Результат відповіді, введений за допомогою розширеного шаблону (1), надходить до блоку попередньої обробки (2), де відбувається класифікація групи завдань (напр. алгебра, аналітична геометрія, математичний аналіз, диференціальні рівняння та ін.) за допомогою аналізу проіндексованих значень візуального редактора та перевірки мітки викладача (в якій міститься інформація про однозначність чи неоднозначність введеної відповіді).

За результатами аналізу однозначні відповіді проходять спрощену перевірку на порівнювання з еталоном (7). В залежності від імовірності

співпадіння (8) виставляється оцінка (10) або пропонується додаткова перевірка проміжних результатів (9). При цьому до результуючої оцінки додається відповідний штрафний коефіцієнт. У випадку неоднозначності відповіді відбувається класифікація за допомогою блоку (5) та бібліотеки системи комп'ютерної математики (СКМ), що розташована на локальному сервері (6). При створенні тестів викладач може поставити відповідні мітки у формі введення щодо необхідності детального аналізу (5) та надсилання сумнівних результатів на зовнішній сервер. Також викладач може вказати, до якої галузі належить запитання. Це спрощує подальшу автоматизовану перевірку у випадку неоднозначності, оскільки завдання одразу надходить у відповідну бібліотеку блоку (6). Далі результати надходять до блоку (7) або надсилаються на зовнішній сервер більш детального аналізу. Ця функція є опціональною, оскільки такий аналіз зазвичай потребує потужних обчислювальних ресурсів і може зайняти тривалий час при тестуванні великих груп студентів.

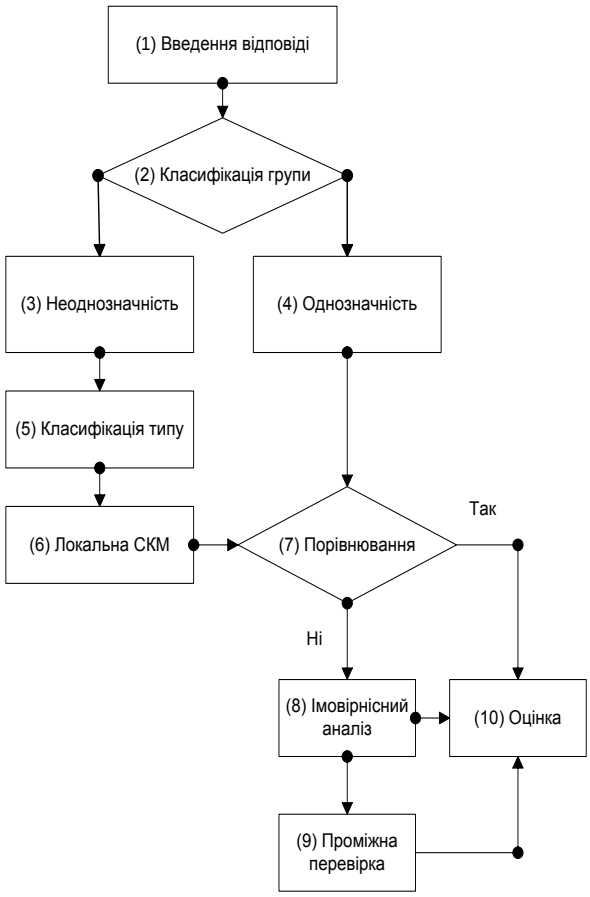


Рис. 2. Схема роботи алгоритму

Структура блоку (6) показана на рисунку 3.

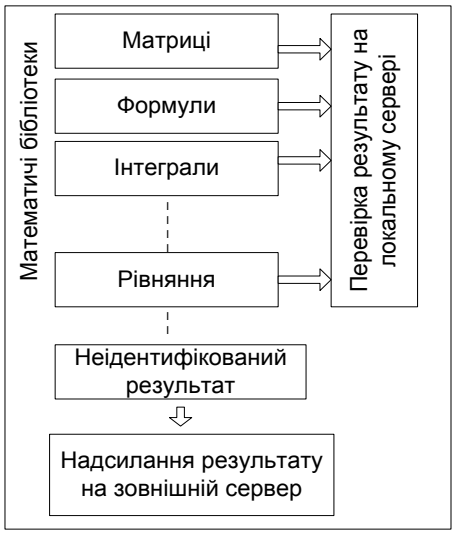


Рис. 3. Структура блоку (6) "Локальна СКМ"

Можливість адаптивного навчання студентів реалізована за схемою, що зображена на рисунку 4.

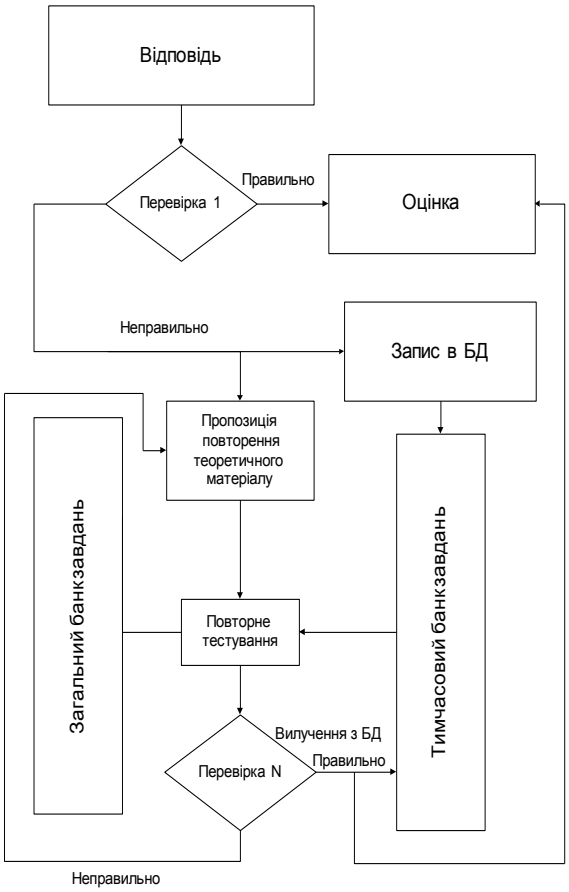


Рис. 4. Схема адаптивного навчання студентів

Ідея полягає в тому, що питання, на які студент дав неправильну відповідь, записуються в базу даних для наступного тестування. Після опрацювання теоретичного матеріалу ці питання (разом з іншими питаннями з банку завдань у відповідному співвідношенні, що задається викладачем) повторно пропонуються для тестування. Після правильної відповіді завдання з банку даних вилучається. Кількість можливих тестувань залежить від оцінки за попередній тест.

Висновки

Засоби комп'ютерного тестування широко використовуються для контролю знань студентів як на етапі самоперевірки, так і під час рубіжного контролю, та значно полегшують перевірку розв'язків великої кількості математичних прикладів при роботі з широкою аудиторією студентів. На практиці переважно застосовують кілька стандартних форм комп'ютерних тестових завдань. При підготовці тестових завдань важливе значення має правильний вибір типу завдань, який буде використовуватися при перевірці знань стосовно того чи іншого об'єкта вивчення. Вибір типу тестового завдання визначається характером структурних компонентів умінь, що є об'єктом контролю.

Загальновживаних форм, що передбачають завдання з вибором однієї чи кількох правильних варіантів відповідей, завдання на встановлення відповідностей, виявляється недостатньо для об'єктивного оцінювання правильності виконання завдань з математичних дисциплін. Взагалі, краще віддавати перевагу завданням з вільним складанням відповідей, коли відповідь має вигляд: терміна, символу, формули або запису, введення яких з клавіатури не потребує багато часу і високого рівня підготовки до роботи; цифри або числа.

У запропонованому підході модифікація редактора формул передбачає створення шаблонів для введення формул та використання алгоритму індексації елементів виразу, що дає можливість уникнути неоднозначності при введенні відповіді студентами. Завдання з комп'ютерною перевіркою аналітичного символьного виразу можуть бути застосовані для автоматизації перевірки вмінь і знань з природничих дисциплін шляхом відповідної модифікації шаблону.

Список використаних джерел

1. *Аванесов В.С.* Научные проблемы тестового контроля знаний / В. Аванесов. – Москва: Исслед. центр, 1994. – 135 с.
2. *Жарких Ю.С.* Комп'ютерні технології в освіті. Навчальний посібник / Ю.С. Жарких, С.В. Лисоченко, Б.Б. Сусь, О.В. Третяк. – К.: ВПЦ "Київський університет", 2012. – 239 с.
3. *Firemath* – The MathML Editor. [Електронний ресурс]. – Доступний з: http://www.firemath.info/ – 2013.
4. *Тмєнова Н.П.* Особливості комп'ютерного тестування з математичних дисциплін в електронних навчальних середовищах / Н.П. Тмєнова, Б.Б. Сусь // Матеріали 5-ї науково-практичної конференції "Інноваційні комп'ютерні технології у вищій школі " – 19-21 Листопада 2013, НУЛП Львів (Україна). – 2013. – Р. 52-55.

References

1. AVANESOV, V. (1994) *Scientific problems of test knowledge control*. – Moscow: Research center.
2. ZHARKIH, YU., LYSOCHENKO, S., SUS, B. and TRETYAK, O. (2012) *Computer Technologies in Education.* – Kyiv. Taras Shevchenko University.
3. FIREMATH. (2013) – *The MathML Editor. [Electronic Resource]*. – Available from: http://www.firemath.info/ – Title from the screen. [Accessed: 19th November 2013].
4. TMYENOVA N.P., SUSE B.B. (2013) Features of computer mathematics testing in e-learning environments // *5th Scientific Conference Preceedings "Innovative computer technologies in higher education"*, Tuesday 19th to Thursday 21st November 2013. NULP Lviv (Ukraine), pp. 52-55.

Надійшла до редколегії 24.04.2014

УДК 004.414.32;

Шабелюк О. В.[1], аспірант.

Система мобільного навчання фізичним дисциплінам (на прикладі лабораторного практикуму з оптики)

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: Shabeliuk@gmail.com

O. V. Shabeliuk[1], graduate student.

Mobile learning system of physical disciplines (on example laboratory work of optics)

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: Shabeliuk@gmail.com

Описується система мобільного навчання для студентів природничих спеціальностей, яка побудована на клієнт-серверній моделі. Сервер представлений як Web сервіс з базами даних в яких зберігається данні про викладачів, студентів та інформація про виконання робіт. Запропонований механізм індивідуалізації виконання лабораторної роботи через модуль генерації вхідних даних. Клієнтська частина складається з двох мобільних додатків: для викладачів та для студентів. Сервер забезпечує обмін даними між цими додатками. Запропонована детальна структура функціональної частини додатків, що дозволяє забезпечити повний навчальний процес. Описаний процес роботи прототипу системи на прикладі формування практичного завдання та виконання лабораторної роботи «Вивчення законів відбиття та заломлення світла на плоскій поверхні поділу двох середовищ». Використання такої системи дозволить забезпечувати мобільність навчального процесу в площині практичних занять для студентів технічних спеціальностей, а також забезпечить можливість проходження лабораторного курсу як додаткового у разі його відсутності в основній програмі.

Ключові слова: мобільне навчання, дистанційне навчання, фізичний практикум.

Mobile learning system for students of natural sciences professions built on client-server model is described. The server is represented as a Web service with a database that contains data about teachers, students and information about the execution of laboratory works. Proposed mechanism for individualizing of laboratory work through module of generation input data. The client side consists of two mobile applications: for teachers and for students. The server provides data exchange between this applications. Represented a detailed functional structure of mobile applications that allows provide complete learning process. Described a process of working system prototype on example of formation practical tasks and process work with laboratory work "Study of the laws of reflection and refraction of light at a plane interface between two media". Using this system will provide mobility of educational process in the plane of practical training for students of technical specialties, and possibility of passing laboratory courses as an additional, even if it is missing in the main program.

Key Words: mobile learning, distance learning, physical laboratory works.

Статтю представив д.ф.-м.н. проф. Анісімов А.В.

Вступ. Системи мобільного навчання пропонують орієнтоване на студента, гнучке і максимально оптимізоване навчальне середовище чим дозволяють ефективно долати три традиційні обмеження класичного процесу освіти — фіксований час, фіксоване місце та фіксована темп навчання [1].

На сьогодні найбільш популярною формою мобільного навчання є системи мікронавчання [2]. Вони побудовані за принципом доступу до відносно невеликого теоретичного курсу, а після ознайомлення з ним, розв’язання контрольних, здебільшого тестових, завдань, для перевірки якості засвоєння поданого матеріалу. Для природничих дисциплін також виникає потреба в

© О.В. Шабелюк, 2014

реалізації системи лабораторних робіт, які дозволяють на практиці перевірити отримані студентом теоретичні знання та оцінити реальну глибину розуміння матеріалу [3].

Оптичний практикум є зручним середовищем для апробації концепції мобільної системи практичного навчання фізичним дисциплінам, оскільки візуалізація є максимально реалістичною за рахунок роботи з лінійною оптикою, а математичний апарат при цьому містить відносно нескладні рівняння для обчислень параметрів лабораторних експериментів.

Побудований програмний прототип системи мобільного виконання практикуму з оптики складається з серверної частини (бази даних та інтерфейс) та двох клієнтських додатків (викладача та студента).

Серверна частина. Мобільні мережі поки що не можуть забезпечити швидку передачу даних від мобільних пристроїв до сервера, тому мобільні пристрої повинні мати досить високу потужність і виконувати основну масу обчислень. Для побудови прототипу системи було використано дворівневу клієнт-серверну архітектуру, в якій клієнти є «товстими» клієнтами.

Серверна частина системи повинна забезпечувати обмін та збереження даних між клієнтами користувачами системи. Під час розробки прототипу системи було обрано серверне веб-застосування phpMyAdmin і побудовані необхідні бази даних на MySQL [4].

Існує два типи користувачів:

Студент. Сервер має ідентифікувати студента при авторизації, запропонувати виконати доступні практичні заняття, в разі необхідності персонально згенерувати вхідні данні до практикуму, записати час початку і закінчення виконання практикуму, обрахувати тривалість виконання, отримати звіт про виконання практичної роботи, забезпечити обмін повідомленнями між студентом і викладачем, зберігати історію спілкування, переглядати результати оцінювання робіт.

Викладач. Сервер має ідентифікувати викладача при авторизації, забезпечувати можливість реєстрації викладачем нових студентів на відповідні практикуми, забезпечувати доступ до бази даних про виконання робіт з можливістю перегляду звіту виконання практичної роботи, забезпечити обмін повідомленнями між студентом і викладачем, зберігати історію спілкування, виставлення оцінки за виконану роботу.

Виходячи з системних потреб побудована серверна частина містить наступні модулі:

1) База даних викладачів
2) База даних студентів
3) База даних з інформацією про виконання практичних робіт з прикріпленими звітами
4) Модуль генерації випадкових вхідних параметрів
5) Модуль спілкування студент-викладач

База даних викладачів. Редагується безпосередньо адміністратором системи мобільного навчання і містить в собі наступні дані про викладача: ПІБ, вчене звання та ступінь, факультет, кафедра, логін та пароль для входу в систему користувацького додатку викладача.

База даних студентів. Редагується безпосередньо викладачами через користувацький додаток викладача, або безпосередньо через доступ до серверу бази даних, і містить в собі наступні дані про студента: ПІБ, факультет, кафедра, курс, група та ПІБ викладача, з бази даних викладачів, закріпленого за цим студентом, логін та пароль для входу в систему користувацького додатку студента.

База даних з інформацією про виконання практичних робіт з прикріпленими звітами. Автоматично генерується через користувацький додаток студента після надсилання звіту про виконання роботи, і містить в собі наступні дані:

- ПІБ студента, що виконав роботу
- номер лабораторної роботи
- час початку роботи
- час закінчення роботи
- посилання на файл звіту виконання лабораторної роботи
- посилання на файл діалогу студент-викладач цієї роботи
- оцінка за практикум

Модуль генерації випадкових початкових параметрів лабораторних експериментів. Даний модуль забезпечує кожного користувача студента набором персональних початкових параметрів, утворених генератором випадкових чисел в заданому проміжку. Тобто на прикладі лабораторної роботи «Вивчення законів відбиття та заломлення світла на плоскій поверхні поділу двох середовищ», що передбачає наявність двох середовищ з різними показниками заломлення, а саме повітря $n_1=1$ та досліджуваний зразок $n_2=x$. Генеруючи значення x в межах від 1.31 до 4.01

можливо задати студенту для дослідження будь-яку речовину від льоду до кремнію.

Таким чином генеруючи вхідні данні для кожної лабораторної роботи отримуємо абсолютно персоналізовані звіти, фізичні залежності, висновки, тощо, що дозволяє оцінити роботу кожного конкретного користувача студента.

Оскільки непотрібно забезпечувати велику вибірку випадкових величин для кожного нашого параметру, даний модуль реалізований звичайною функцією rand(min, max) [5] (вибираємо випадкове значення параметру з заданого діапазону від мінімально до максимально допустимого).

Модуль спілкування студент-викладач. Даний модуль забезпечує можливість обміну повідомленнями між користувачем-студентом і користувачем-викладачем, а також подальше збереження їх діалогів. Особливість реалізації цього модулю є те, що кожне повідомлення позначається мітками. Для користувача-викладача доступні два види міток:

1) технічні запитання – дозволяють обмінюватись повідомленнями які не стосуються виконання конкретної лабораторної роботи, а носять суто робочий характер спілкування.
2) додаткові запитання – дозволяють викладачу задавати уточнюючі питання, щодо виконання конкретної лабораторної роботи, що дозволяє найбільш об'єктивно оцінити студента.

Для користувача студента теж доступні два види міток: технічні запитання – аналогічно до викладача, та апеляція – дозволяють студенту задавати питання стосовно оцінювання тієї чи іншої частини його виконаної лабораторної роботи до викладача що її перевірив.

Кожен із діалогів студент-викладач прив'язується до відповідної лабораторної роботи і зберігається навіть після оцінювання роботи, для можливості його перегляду вразі необхідності.

Клієнтська частина. Складається з двох типів користувацьких додатків: додаток для викладачів та додаток для студентів.

Додаток для викладачів.

Одразу після запуску додатку система перевіряє наявність підключення до Інтернету, адже основні компоненти

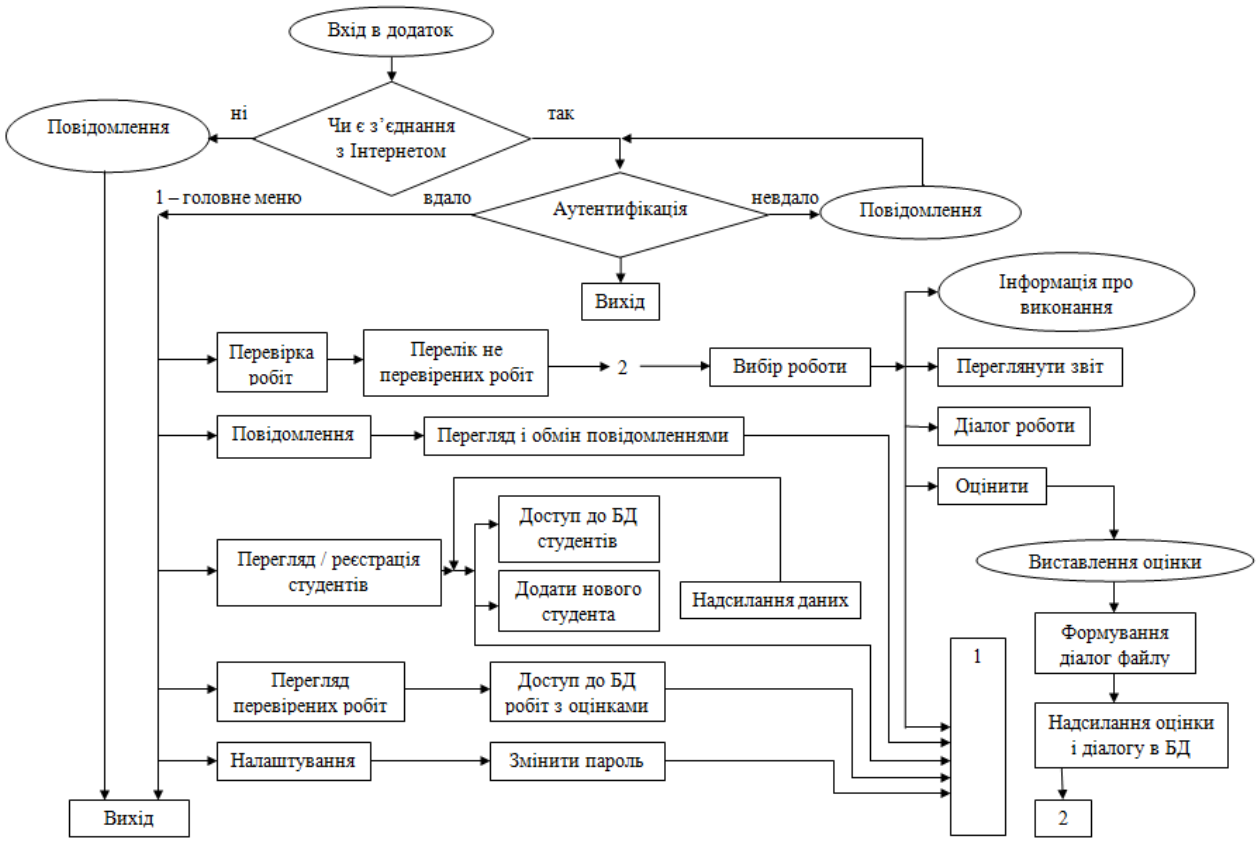


Рис. 1 Блок-схема мобільного додатку для викладачів

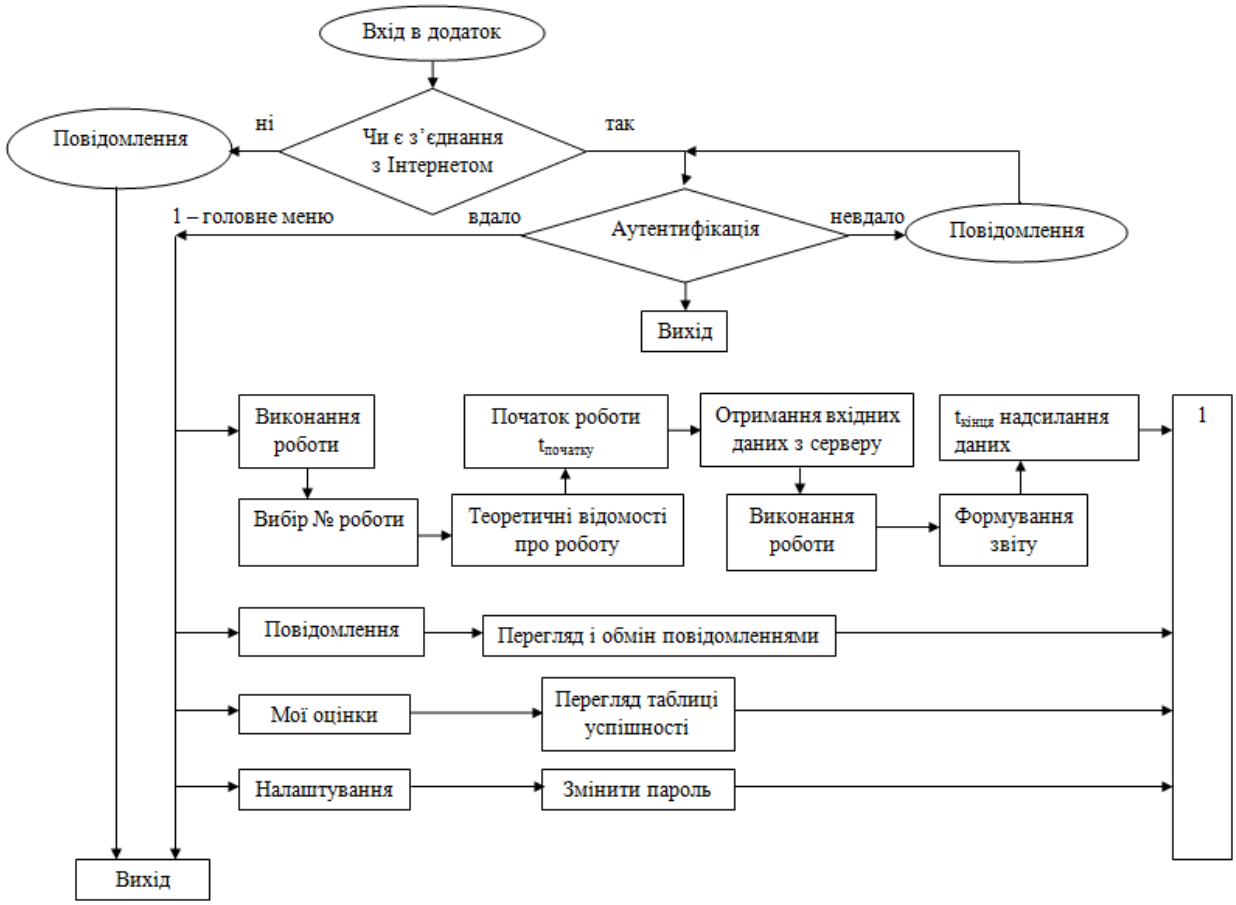


Рис. 2 Блок-схема мобільного додатку для студентів

працюють з серверними базами даних, тому вразі відсутності підключення система сповістить про це і запропонує вийти з додатку. Якщо підключення є, система запропонує авторизуватись або вийти. При вдалій авторизації користувач потрапляє на головне меню.

Головне меню складається з шести основних можливостей (активностей): «Перевірка робіт», «Обмін повідомленнями», «Перегляд або реєстрація студентів», «Перегляд архіву перевірених робіт», «Налаштування та вихід».

Перевірка робіт включає в себе перегляд не перевірених робіт та вибір однієї з них. При виборі роботи викладач бачить інформацію про виконання роботи: ПІБ студента, що виконав дану роботу, номер роботи, час початку виконання, час закінчення виконання та тривалість виконання роботи; а також йому доступні активності перегляду звіту роботи, перегляду діалогу студент-викладач цієї роботи, активність оцінювання та повернення до головного меню.

Після оцінювання роботи сама оцінка та файл діалогу роботи надсилаються на сервер, а викладач потрапляє на активність вибору неперевіреної роботи з переліку.

Активність «Обмін повідомленнями» дозволяє викладачу переглядати діалоги його спілкування з студентами, та відразу з активності відправляти їм свої повідомлення.

Активність перегляду або реєстрації нових студентів дозволяє передивлятись інформацію про студентів, їхню успішність, а також додавати нових студентів до системи.

Перегляд архіву перевірених робіт дозволяє отримувати доступ до інформації в разі виникнення необхідності.

Активність налаштування дозволяє оптимізувати та налаштувати додаток під свій мобільний пристрій, а також змінити пароль доступу до свого облікового запису.

Додаток для студентів.

Так само як і викладацький додаток одразу після запуску система перевіряє наявність

підключення до Інтернету, адже основні компоненти працюють з серверними базами даних, тому вразі відсутності підключення система сповістить про це і запропонує вийти з додатку. Якщо підключення є, система запропонує авторизуватись або вийти. При вдалій авторизації студент потрапляє на головне меню.

Головне меню складається з п'яти основних активностей: виконання роботи, обмін повідомленнями, перегляд успішності, налаштування та вихід.

Активність виконання роботи дозволяє студенту обрати яку саме роботу він буде виконувати із переліку доступних йому робіт.

При виборі практичної роботи йому буде запропоновано прочитати короткі теоретичні відомості, після яких він зможе приступити безпосередньо до виконання роботи.

При початку виконання роботи, додаток відправляє на сервер інформацію про час початку виконання та запит на отримання від сервера генерованих початкових параметрів.

Після отримання початкових даних мобільний додаток студента завантажує середовище виконання роботи.

Подальше виконання роботи безпосередньо залежить від теми практикуму і має бути алгоритмічно та практично розроблено для кожної роботи індивідуально, так само як і алгоритм формування звіту про виконання роботи.

Для виконання лабораторної роботи «Вивчення законів відбиття та заломлення світла на плоскій поверхні поділу двох середовищ» [6] генеруються вхідні параметри установки: інтенсивність падаючого світла, поляризатор з заданим азимутом поляризації.

Для виконання роботи студенту пропонується проводити маніпуляції з віртуальними фізичними об'єктами: джерелом світла, поляризатором, досліджуваним зразком та датчиком вимірювання інтенсивності світла.

Студент має поетапно виконати всі завдання до лабораторної роботи:

1. На основі аналізу формул Френеля візуально визначити положення поляризатора P, при якому азимут поляризації α набуває значень: а) $\alpha = 0^o$; б) $\alpha = 90^o$.
2. Експериментально отримати кутову залежність коефіцієнта відбиття $\rho_s(\varphi)$ і порівняти її з розрахованою за формулами Френеля.
3. Експериментально отримати кутову залежність коефіцієнта відбиття $\rho_p(\varphi)$ і порівняти її з розрахованою за формулами Френеля.
4. Визначити відносний показник заломлення n матеріалу досліджуваного зразка.
5. Визначити азимут поляризації α для лінійної поляризації падаючого випромінювання.

Для того щоб виконати поставлені роботою завдання студенту необхідно здійснити наступні дії з віртуальними об'єктами:

1. Виставити початкове значення кута спостереження, яке повинно становити 180^o
2. Обертаючи віртуальний поляризатор (якщо цього вимагає завдання), виставити потрібний азимут поляризації α.
3. Виміряти величину інтенсивності падаючого випромінювання I_e (у відносних одиницях).
4. Розташувати в центрі системи платівку досліджуваного матеріалу і зорієнтувати її таким чином, щоб вісь обертання столика, на якому вона розташована, знаходилась у площині поверхні досліджуваного матеріалу.
5. Виставити поточне значення кута спостереження (який відповідно до закону відбиття вдвічі більший за кут падіння) і виміряти величину інтенсивності відбитого від зразка випромінювання (у відносних одиницях).
6. Обробити отримані експериментальні значення величини інтенсивності відбитого випромінювання.

Після виконання необхідних дій, додаток запропонує відповісти на контрольні запитання та тестові завдання до теми даної роботи, відповіді яких разом з вхідними і виміряними даними будуть включені до звіту.

По закінченню виконання роботи, додаток відправляє на сервер генерований звіт та інформацію про час закінчення, а студент потрапляє на головне меню.

Активність обміну повідомленнями дозволяє студенту переглядати діалоги його спілкування з викладачем, та відразу з активності відправляти йому свої повідомлення.

Перегляд успішності дозволяє переглядати оцінки за виконання практичних робіт.

Активність налаштування дозволяє оптимізувати та налаштувати додаток під свій мобільний пристрій, а також змінити пароль доступу до свого облікового запису.

Висновки:

На основі описаної в статті концепції побудовано прототип-системи на базі мобільної ОС Android 4.0.1, для виконання лабораторної роботи «Вивчення законів відбиття та заломлення світла на плоскій поверхні поділу двох середовищ», що передбачає експериментальну перевірку формул Френеля та визначення показника заломлення експериментального зразка.

Використання такої системи дозволить студентам:

- гнучко планувати свій навчальний процес, не прив'язуючись до розташування та графіку роботи навчальних лабораторій;
- у будь-який час і будь-де мати доступ до навчальних матеріалів і можливості консультації з викладачем;
- мати можливість проходження лабораторного курсу як додаткового, у разі його відсутності в основній програмі.

Використання такої системи дозволить викладачам:

- розширити можливості до мобільності під час навчального процесу;
- набирати необмежену кількість студентів на один й той самий практичний курс, оскільки знімаються класичні обмеження щодо кількості реальних практичних установок та графіку роботи лабораторії;
- створювати нові практичні курси на основі побудованої систем.

Список використаних джерел

1. *Калуга Т.А.* Мобильное обучение в дистанционном образовании / Т.А. Калуга // Вісник ЛНУ імені Тараса Шевченка, - №12 (223). - Ч. 1. - 2011. 113-124 с.
2. *Weber Ch.M.* Rapid Learning in High Velocity Environment: Dissertation to the Degree of Doctor of Philosophy in Management of Technological Innovation and Entrepreneurship / Ch.M. Weber – Massachusetts Institute of Technology, 2003. – 569 p.
3. *Баран Е.Д* Лабораторный практикум для дистанционного обучения общетехническим дисциплинам. Образовательные, научные и инженерные приложения в среде LabVIEW и технологии National Instruments: Сборник трудов / Е.Д. Баран, А.Ю. Любенко // Международная научно-практическая конференция. Москва, 2004 г. - М.: Изд-во РУДН. - 2004.
4. *Delisle M.* Mastering phpMyAdmin 3.4 for Effective MySQL Management / M. Delisle - Packt Publishing, 2012. - 366 p.
5. *Schneier B.* Applied Cryptography: Protocols, Algorithms, and Source Code in C / B. Schneier - John Wiley & Sons, New York. - 1996.
6. *Кисленко В.І.* Методичні вказівки до лабораторних робіт з курсу «Загальна фізика» (Розділ «Оптика») / В.І. Кисленко, В.М. Стецюк, І.М. Халімонова, Н.П. Харченко – Київський національний університет імені Тараса Шевченка, ВЦ: «Київський університет». - 2002.

References

1. KALUGA, T.A. (2011) Mobilnoe obuchenie v distancionnom obrazovanii. In *Visnuk LNU imeni Tarasa Shevchenka*, - №12 (223). – part 1. - 113-124 p.
2. WEBER, Ch.M. (2003) *Rapid Learning in High Velocity Environment: Dissertation to the Degree of Doctor of Philosophy in Management of Technological Innovation and Entrepreneurship* – Massachusetts Institute of Technology. – 569 p.
3. BARAN E.D. and LUBENKO A.U. (2004) Laboratorniy praktikum dlya distancionnogo obucheniya obschetexnicheskim disciplinam. Obrazovatelnie, nauchnie i ingenernie prilogeniya v srede LabVIEW i texnologii National Instruments: Sbornik trudov. In *Megdunarodnaya nauchno-prakticheskaya konferenciya. Moskva, 2004. - M.: Izdatelstvo RUDN*.
4. DELISLE, M. (2012) *Mastering phpMyAdmin 3.4 for Effective MySQL Management*. - Packt Publishing. - 366 p.
5. SCHNEIER, B. (1996) *Applied Cryptography: Protocols, Algorithms, and Source Code in C*. - John Wiley & Sons, New York.
6. KYSLENKO, V.I., STECIUK, V.M., XALIMONOVA, I.M. and XARCHENKO N.P. (2002) *Metodychni vkazivky do laboratornyh robit z kursu "Zagalna Fizyka" (Rozdil "Optyka")* – Kievskiy nacionalniy universitet imeni Tarasa Shevchenka, VC: "Kievskiy universitet".

Надійшла до редколегії 03.06.14

УДК 004.42:510.69

Шкільняк С. С.[1], д. ф.-м. н., проф.,
Волковицький Д. Б.[1], аспірант.

Реномінативні композиційно-номінативні логіки з предикатами рівності

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т Глушкова, 4д,
e-mail: ttp@unicyb.kiev.ua

S.S. Shkilniak[1], Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof.,
D.B. Volkovytskyi[1], Postgraduate Student

Renominative composition-nominative logics with predicates of equality

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: ttp@unicyb.kiev.ua

Досліджено нові класи програмно-орієнтованих логічних формалізмів – реномінативні логіки квазіарних предикатів з рівністю. Запропоновано дві різновидності таких логік – реномінативні логіки із предикатами строгої рівності та реномінативні логіки із предикатами слабкої рівності. Розглянуто семантичні властивості цих логік, зокрема, властивості відношень логічного наслідку для множин формул.

Ключові слова: логіка, предикат, реномінація, логічний наслідок.

We study new classes of program-oriented logical formalisms – renominative logics of quasi-ary predicates with equality. They occupy intermediate position between propositional logic and first-order composition-nominative logics. These logics extend common renominative logics. Two classes of such logics are proposed: renominative logics with predicates of strong equality $\equiv_{xy}$ and renominative logics with predicates of weak equality $=_{xy}$. We consider their following subclasses: logics with total unessential variables and logics with special variable definedness predicates. Properties of the predicates $\equiv_{xy}$ and $=_{xy}$ are investigated. It is shown that a predicate $\equiv_{xy}$ can be expressed through $=_{xy}$ and variable definedness predicates. We define semantic models and languages of the introduced logics and consider their semantic properties: properties of logical consequence relations for sets of formulas in renominative logics of partial single-valued, total multiple-valued and partial multiple-valued quasi-ary predicates are described. These properties are a semantic basis for construction of sequent calculi for the proposed classes of renominative logics; such calculi will be explored in future papers.

Key words: logic, predicate, renomination, logical consequence.

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Буй Д.Б.

Розширення сфери застосування інформаційних технологій робить актуальною задачу створення надійних і ефективних програмних систем. Вирішення цієї задачі неможливе без всебічного використання апарату математичної логіки. Проте класична логіка предикатів, на якій зазвичай базуються логічні системи, що застосовуються в інформатиці й програмуванні, має низку принципових обмежень. Вона недостатньо враховує неповноту, частковість інформації про предметну область. Тому на перший план висувається проблема побудови нових, програмно-орієнтованих логічних формалізмів. Такими є композиційно-номінативні логіки (КНЛ) квазіарних предикатів, будовані на базі спільного для логіки й програмування композиційно-номінативного підходу [1].

Метою даної роботи є побудова та дослідження нових класів КНЛ – реномінативних логік з рівністю. Вони займають проміжне становище між пропозиційною логікою та першопорядковими КНЛ і є розширенням відомих [1] реномінативних логік (РНЛ). Пропонуються дві різновидності таких логік – реномінативні логіки із предикатами рівності (РНЛР) та реномінативні логіки із предикатами слабкої рівності (РНЛРС).

Поняття, які тут не визначаються, тлумачимо в сенсі робіт [1, 2]. Для полегшення читання наведемо основні визначення.

Під предикатом на множині D розумітимемо довільну (часткову неоднозначну, взагалі кажучи) функцію вигляду $P : D \to \{T, F\}$.

Тут $\{T, F\}$ – множина істиннісних значень.

© С.С. Шкільняк, Д.Б. Волковицький, 2014

Область істинності та *область хибності* предиката P на D – це множини:

$$\boldsymbol{T}(P) = P^{-1}(T) = \{d\in D \mid T\in P(d)\},$$
$$\boldsymbol{F}(P) = P^{-1}(F) = \{d\in D \mid F\in P(d)\}.$$

Предикат P однозначний $\Leftrightarrow \boldsymbol{T}(P)\cap\boldsymbol{F}(P) = \varnothing$.

Предикат P тотальний $\Leftrightarrow \boldsymbol{T}(P)\cup\boldsymbol{F}(P) = D$.

Як зазначено в [2], ми трактуємо часткові неоднозначні предикати на множині D як відповідності (відношення) між D та $\{T, F\}$. Такі предикати названі предикатами реляційного типу, вони формалізують найпростіше уточнення поняття часткового неоднозначного предиката. Ми трактуємо $P(d)$ як множину значень, які P може приймати на $d\in D$. Зрозуміло, що $P(d)\subseteq\{T, F\}$.

Предикат $P: D\to\{T, F\}$ називаємо:

– неспростовним, або частково істинним, якщо $\boldsymbol{F}(P) = \varnothing$;

– виконуваним, якщо $\boldsymbol{T}(P) \neq \varnothing$;

– тотожно істинним, якщо $\boldsymbol{T}(P) = D$ і $\boldsymbol{F}(P) = \varnothing$;

– тотожно хибним, якщо $\boldsymbol{T}(P) = \varnothing$ і $\boldsymbol{F}(P) = D$.

Кожний неспростовний та кожний невиконуваний предикат є однозначними.

Частково істинний предикат може не бути виконуваним. Таким є всюди невизначений предикат.

Для однозначних предикатів традиційно пишемо $P(d) = T$ та $P(d) = F$. Області істинності й хибності однозначних предикатів задаємо так:

$$T(P) = \{d\in D \mid P(d) = T\},$$
$$F(P) = \{d\in D \mid P(d) = F\}.$$

1. Іменні множини та квазіарні предикати

Нехай V та A – довільні множини, трактуємо їх як множину предметних імен (змінних) та множину предметних значень (базових даних).

V-іменна множина (V-ІМ) над A – це однозначна функція вигляду $\delta: V\to A$.

Клас всіх V-ІМ над A позначимо ${}^{V}A$.

V-ІМ подаємо у вигляді $[v_1\mapsto a_1,...,v_n\mapsto a_n,...]$. Тут $v_i\in V$, $a_i\in A$, причому $v_i\neq v_j$ при $i\neq j$. В записі V-ІМ вигляду $[v_1\mapsto f_1(d),..., v_n\mapsto f_n(d)]$ указуємо лише ті компоненти $v_i\mapsto f_i(d)$, для яких $f_i(d)\downarrow$.

Для V-ІМ вводимо функцію $asn: {}^{V}A\to 2^{V}$ так:

$asn(d) = \{v\in V \mid v\mapsto a\in d$ для деякого $a\in A\}$;

Для V-ІМ вводимо теоретико-множинні операції $\cap$ та $\setminus$. Водночас при об'єднанні V-ІМ може порушуватись однозначність іменування.

Введемо параметричну операцію $\|X$ звуження V-ІМ за множиною $X\subseteq V$: $d\|X = \{v\mapsto a\in d \mid v\in X\}$.

Задаємо операцію $\|_{-X}$ видалення у V-ІМ компонент з іменами із множини X: $d\|_{-X} = d\|(V\setminus X)$.

Замість $d\|_{-\{v_1,...,v_n\}}$ та $d\|_{-\{x\}}$ також скорочено пишемо $d\|_{-v_1,...,v_n}$ та $d\|_{-x}$.

Параметричну операцію реномінації (перейменування) $\mathrm{r}^{v_1,...,v_n}_{x_1,...,x_n}: {}^{V}A\to{}^{V}A$ задамо так:

$$\mathrm{r}^{v_1,...,v_n}_{x_1,...,x_n}(d) = [v_1\mapsto d(x_1),...,v_n\mapsto d(x_n)]\cup(d\|_{-\{v_1,...,v_n\}}).$$

Ввівши для $y_1,..., y_n$ скорочене позначення $\bar{y}$, замість $\mathrm{r}^{v_1,...,v_n}_{x_1,...,x_n}$ також пишемо $\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$.

Послідовне застосування двох операцій $\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$ та $\mathrm{r}^{\bar{u}}_{\bar{y}}$ можна подати у вигляді однієї операції реномінації, яку назвемо згорткою операцій $\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$ та $\mathrm{r}^{\bar{u}}_{\bar{y}}$.

Нехай маємо послідовне застосування двох операцій реномінації $\mathrm{r}^{v_1,...v_n,u_1,...,u_k}_{s_1,...,s_n,z_1,...,z_k}$ та $\mathrm{r}^{v_1,...,v_n,w_1,...,w_m}_{x_1,...,x_n,y_1,...,y_m}$, де $\{w_1,...,w_m\}\cap\{u_1,...,u_k\} = \varnothing$. Для кожного $d\in{}^{V}A$ тоді $\mathrm{r}^{v_1,...,v_n,w_1,...,w_m}_{x_1,...,x_n,y_1,...,y_m}(\mathrm{r}^{v_1,...v_n,u_1,...,u_k}_{s_1,...,s_n,z_1,...,z_k}(d)) = \mathrm{r}^{v_1,...,v_n,w_1,...,w_m,u_1,...,u_k}_{a_1,...,a_n,b_1,...,b_m,z_1,...,z_k}(d)$, де кожні a_i та b_j задаються так:

$$a_i = \begin{cases} x_i, \text{ якщо } x_i\notin\{v_1,...v_n,u_1,...,u_k\},\\ s_l, \text{ якщо } x_i = v_l \text{ для деякого } v_l,\\ z_l, \text{ якщо } x_i = u_l \text{ для деякого } u_l;\end{cases}$$

$$b_j = \begin{cases} y_j, \text{ якщо } y_j\notin\{v_1,...v_n,u_1,...,u_k\},\\ s_l, \text{ якщо } y_j = v_l \text{ для деякого } v_l,\\ z_l, \text{ якщо } y_j = u_l \text{ для деякого } u_l.\end{cases}$$

Таку $\mathrm{r}^{v_1,...,v_n,w_1,...,w_m,u_1,...,u_k}_{a_1,...,a_n,b_1,...,b_m,z_1,...,z_k}$ назвемо *згорткою* операцій $\mathrm{r}^{v_1,...,v_n,w_1,...,w_m}_{x_1,...,x_n,y_1,...,y_m}$ (зовнішня, застосовується другою) та $\mathrm{r}^{v_1,...v_n,u_1,...,u_k}_{s_1,...,s_n,z_1,...,z_k}$ (внутрішня, застосовується першою); позначаємо її $\mathrm{r}^{v_1,...,v_n w_1,...,w_m}_{v_1,...,v_n w_1,...,w_m}\bullet^{v_1,...,v_n u_1,...,u_k}_{s_1,...,s_n z_1,...,z_k}$.

В скороченому вигляді згортку операцій $\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$ (зовнішня) та $\mathrm{r}^{\bar{u}}_{\bar{y}}$ (внутрішня) позначаємо $\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}\bullet\mathrm{r}^{\bar{u}}_{\bar{y}}$.

Твердження 1. Згортка операцій реномінації асоціативна та некомутативна.

Справді, для кожного $d\in{}^{V}A$ маємо:

$$\mathrm{r}^{\bar{y}}_{\bar{x}}\bullet\mathrm{r}^{\bar{u}}_{\bar{y}}\left(\mathrm{r}^{\bar{w}}_{\bar{z}}(d)\right) = \mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}\left(\mathrm{r}^{\bar{u}}_{\bar{y}}\bullet\mathrm{r}^{\bar{w}}_{\bar{z}}(d)\right) = \mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}\left(\mathrm{r}^{\bar{u}}_{\bar{y}}\left(\mathrm{r}^{\bar{w}}_{\bar{z}}(d)\right)\right).$$

Водночас $\mathrm{r}^{x}_{y}\left(\mathrm{r}^{y}_{x}(d)\right) = \mathrm{r}^{x}_{y}\bullet\mathrm{r}^{y}_{x}(d)) = \mathrm{r}^{x,y}_{x,x}(d) = \mathrm{r}^{y}_{x}(d)$;

$$\mathrm{r}^{y}_{x}\left(\mathrm{r}^{x}_{y}(d)\right) = \mathrm{r}^{y}_{x}\bullet\mathrm{r}^{x}_{y}(d)) = \mathrm{r}^{y,x}_{y,y}(d) = \mathrm{r}^{x}_{y}(d).$$

Твердження 2. Операція $\mathrm{r}^{v_1,...,v_n}_{x_1,...,x_n}$ монотонна: якщо $d_1\subseteq d_2$, то $\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d_1)\subseteq\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d_2)$.

Твердження 3. Елімінація тотожних перейменувань: $\mathrm{r}^{\bar{z},\bar{v}}_{\bar{z},\bar{x}}(d) = \mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d)$.

Зокрема: $\mathrm{r}^{y,\bar{v}}_{y,\bar{x}}(d) = \mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d)$; $\mathrm{r}^{\bar{z}}_{\bar{z}}(d) = d$; $\mathrm{r}^{y}_{y}(d) = d$.

Предикати вигляду $P: {}^{V}A\to\{T, F\}$ називають *V-квазіарними предикатами на множині A*.

Клас таких предикатів позначаємо Pr^{A}.

Предметне ім'я $x \in V$ (*строго*) *неістотне* для V-квазіарного предиката P, якщо $P(d_1) = P(d_2)$ для довільних $d_1, d_2 \in {}^V A$ таких, що $d_1 \|_{-x} = d_2 \|_{-x}$.

V-квазіарний предикат P *монотонний*, якщо:

$$d \subseteq d' \;\Rightarrow\; P(d) \subseteq P(d').$$

Для однозначних V-квазіарних предикатів монотонність стає еквітонністю.

Однозначний предикат P *еквітонний*, якщо з умови $P(d)\downarrow$ та $d \subseteq d'$ випливає $P(d')\downarrow = P(d)$.

Поняття монотонності малозмістовне для тотальних неоднозначних предикатів, для них адекватним є дуальне поняття антитонності.

V-квазіарний предикат P *антитонний*, якщо:

$$d \subseteq d' \;\Rightarrow\; P(d) \supseteq P(d').$$

2. Композиційні системи реномінативних логік

Семантичною основою логік квазіарних предикатів є композиційні предикатні системи. Для чисто предикатних (нефункціональних) рівнів вони мають вигляд $({}^V A, Pr^A, \boldsymbol{C})$ де $\boldsymbol{C}$ – множина композицій відповідного рівня.

Композиції реномінативного рівня. Композиціями РНЛ є пропозиційні композиції – *логічні зв'язки*, до яких додана композиція *реномінації*.

Основними логічними зв'язками є заперечення $\neg$, диз'юнкція $\vee$, кон'юнкція $\&$, імплікація $\to$, еквіваленція $\leftrightarrow$. Такі пропозиційні композиції є аналогами відповідних сильних зв'язок Кліні.

Предикати $\neg(P)$, $\vee(P, Q)$, $\&(P, Q)$, $\to(P, Q)$, $\leftrightarrow(P, Q)$ позначаємо $\neg P$, $P \vee Q$, $P \& Q$, $P \to Q$, $P \leftrightarrow Q$.

Базові пропозиційні композиції – це $\neg$ та $\vee$.

Дамо їх визначення через області істинності та хибності відповідних предикатів:

$\boldsymbol{T}(\neg P) = \boldsymbol{F}(P)$; $\quad \boldsymbol{F}(\neg P) = \boldsymbol{T}(P)$;

$\boldsymbol{T}(P \vee Q) = \boldsymbol{T}(P) \cup \boldsymbol{T}(Q)$; $\quad \boldsymbol{F}(P \vee Q) = \boldsymbol{F}(P) \cap \boldsymbol{F}(Q)$.

Композиції $\to$, $\&$, $\leftrightarrow$ є похідними, вони виражаються через $\neg$ та $\vee$:

$P \to Q = \neg P \vee Q$; $\; P \& Q = \neg(\neg P \vee \neg Q)$;

$P \leftrightarrow Q = (P \to Q) \& (Q \to P)$.

Основні властивості пропозиційних композицій аналогічні властивостям відповідних класичних логічних зв'язок [3].

1-арна параметрична композиція *реномінації* $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}} : Pr^A \to Pr^A$ кожному V-квазіарному предикату P зіставляє V-квазіарний предикат $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(P)$, значення якого для кожного $d \in {}^V A$ обчислюється так:

$$\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(P)(d) = P(\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d)).$$

Композицію $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$ можна визначити через області істинності й хибності відповідного предиката:

$$\boldsymbol{T}(\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(P)) = \{d \in {}^V A \mid \mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d) \in \boldsymbol{T}(P)\} = (\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}})^{-1}(\boldsymbol{T}(P)),$$

$$\boldsymbol{F}(\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(P)) = \{d \in {}^V A \mid \mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d) \in \boldsymbol{F}(P)\} = (\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}})^{-1}(\boldsymbol{F}(P)).$$

Базові композиції РНЛ – це $\neg$, $\vee$, $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$.

Результатом послідовного виконання двох композицій $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$ (застосовується другою) та $\mathrm{R}^{\bar{w}}_{\bar{y}}$ (застосовується першою) є композиція реномінації $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}} \circ \mathrm{R}^{\bar{w}}_{\bar{y}}$, вона називається *згорткою* композицій $\mathrm{R}^{\bar{w}}_{\bar{y}}$ та $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$. Композиція $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}} \circ \mathrm{R}^{\bar{w}}_{\bar{y}}$ визначається так.

Для кожних $P \in Pr^A$ та $d \in {}^V A$ маємо:

$$\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}} \circ \mathrm{R}^{\bar{w}}_{\bar{y}}(P)(d) = P(\mathrm{r}^{\bar{w}}_{\bar{y}} \square \mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d))$$

Розглянемо властивості композицій реномінації (див. також [1, 2]). Із твердження 1 випливає

Твердження 4. Згортка композицій реномінації асоціативна та некомутативна.

Твердження 5. Якщо $z \notin \{\bar{x}, y\}$, то z неістотне для $\mathrm{R}^{z,\bar{v}}_{z,\bar{x}}(P)$.

Справді, при $z \notin \{\bar{x}, y\}$ маємо: $d_1 \|_{-z} = d_2 \|_{-z} \Rightarrow$

$\Rightarrow \mathrm{r}^{\bar{v},z}_{\bar{x},y}(d_1) = \mathrm{r}^{\bar{v},z}_{\bar{x},y}(d_2) \Rightarrow \mathrm{R}^{\bar{v},z}_{\bar{x},y}(p)(d_1) = \mathrm{R}^{\bar{v},z}_{\bar{x},y}(p)(d_2)$.

RT) $\mathrm{R}^{z,\bar{v}}_{z,\bar{x}}(P) = \mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(P)$ – згортка тотожної пари імен у реномінації.

Справді, для кожного $d \in {}^V A$ маємо: $\mathrm{R}^{z,\bar{v}}_{z,\bar{x}}(p)(d) = p(\mathrm{r}^{z,\bar{v}}_{z,\bar{x}}(d)) = p(\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d)) = \mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(p)(d)$

R$\neg$) $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(\neg P) = \neg \mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(P)$ – R$\neg$-дистрибутивність.

R$\vee$) $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(P \vee Q) = \mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(P) \vee \mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(Q)$ – R$\vee$-дистрибутивність.

Аналогічно записуємо властивості R$\to$, R$\&$, R$\leftrightarrow$.

RR) $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(\mathrm{R}^{\bar{w}}_{\bar{y}}(P)) = \mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}} \circ \mathrm{R}^{\bar{w}}_{\bar{y}}(P)$ – згортка композицій реномінації.

Справді, для кожного $d \in {}^V A$ маємо:

$$\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(\mathrm{R}^{\bar{w}}_{\bar{y}}(P))(d) = \mathrm{R}^{\bar{w}}_{\bar{y}}(P)(\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d)) =$$

$$= P(\mathrm{r}^{\bar{w}}_{\bar{y}}(\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d))) = P(\mathrm{r}^{\bar{w}}_{\bar{y}} \square \mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d)) = \mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}} \circ \mathrm{R}^{\bar{w}}_{\bar{y}}(P)(d).$$

RU) Нехай $z \in V$ неістотне для предиката P. Тоді $\mathrm{R}^{z,\bar{v}}_{y,\bar{x}}(P) = \mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(P)$.

Для всіх $d \in {}^V A$ маємо $\mathrm{r}^{z,\bar{v}}_{y,\bar{x}}(d) \square_{-z} = \mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d) \square_{-z}$, тому якщо z неістотне для p, то маємо $P(\mathrm{r}^{z,\bar{v}}_{y,\bar{x}}(d)) = P(\mathrm{r}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(d))$ для всіх $d \in {}^V A$, що дає $\mathrm{R}^{z,\bar{v}}_{y,\bar{x}}(P)(d) = \mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}(P)(d)$ для всіх $d \in {}^V A$.

Композиції $\neg$, $\vee$, $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$ зберігають [2] монотонність та антитонність квазіарних предикатів.

Предикати-індикатори наявності значення для предметних змінних. Спеціальні 0-арні композиції – предикати-індикатори εz наявності значення для відповідних $z \in V$ – визначаємо [4] так:

$\boldsymbol{T}(\varepsilon z) = \{d \mid d(z)\uparrow\} = \{d \in {}^{V}A \mid z \notin asn(d)\}$;
$\boldsymbol{F}(\varepsilon z) = \{d \mid d(z)\downarrow\} = \{d \in {}^{V}A \mid z \in asn(d)\}$.

Предикати εz тотальні однозначні, проте немонотонні й неантитонні. Кожне $x \in V$ таке, що $x \neq z$, (строго) неістотне для предиката εz.

Властивості реномінації предикатів εz:

$\mathrm{R}^{\bar{x},z}_{\bar{y},u}(\varepsilon z) = \varepsilon u$; зокрема, $\mathrm{R}^{z}_{u}(\varepsilon z) = \varepsilon u$;

$\mathrm{R}^{\bar{x}}_{\bar{y}}(\varepsilon z) = \varepsilon z$ при $z \notin \{\bar{x}\}$; зокрема, $\mathrm{R}^{x}_{y}(\varepsilon z) = \varepsilon z$.

РНЛ з явно заданими предикатами εz назвемо ε-РНЛ. Базові композиції ε-РНЛ: $\neg$, $\vee$, $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$, εz.

Композиції реномінативного рівня з рівністю. Базовими композиціями РНЛ з рівністю є $\neg$, $\vee$, $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$ та спеціальні 0-арні композиції – параметризовані за змінними предикати рівності.

Можна розглядати [5, 6] дві різновидності таких предикатів – предикати строгої (точної) рівності $\equiv_{xy}$ та предикати слабкої рівності $=_{xy}$. Базові композиції РНЛР – це $\neg$, $\vee$, $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$, εz, $\equiv_{xy}$, базові композиції РНЛРС – це $\neg$, $\vee$, $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$, εz, $=_{xy}$.

Розширення РНЛР та РНЛРС явно заданими предикатами εz назвемо ε-РНЛР та ε-РНЛРС.

Базові композиції ε-РНЛР: $\neg$, $\vee$, $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$, εz, $\equiv_{xy}$.

Базові композиції ε-РНЛРС: $\neg$, $\vee$, $\mathrm{R}^{\bar{v}}_{\bar{x}}$, εz, $=_{xy}$.

Предикати $\equiv_{xy}$ та $=_{xy}$ задаються їх областями істинності й хибності наступним чином:

$\boldsymbol{T}(\equiv_{xy}) = \{d \in {}^{V}A \mid d(x)\downarrow, d(y)\downarrow \text{ та } d(x) = d(y)\} \cup$
$\cup \{d \in {}^{V}A \mid d(x)\uparrow \text{ та } d(y)\uparrow\}$,
$\boldsymbol{F}(\equiv_{xy}) = \{d \in {}^{V}A \mid d(x)\downarrow, d(y)\downarrow \text{ та } d(x) \neq d(y)\} \cup$
$\cup \{d \in {}^{V}A \mid d(x)\downarrow, d(y)\uparrow \text{ або } d(x)\uparrow, d(y)\downarrow\}$;
$\boldsymbol{T}(=_{xy}) = \{d \in {}^{V}A \mid d(x)\downarrow, d(y)\downarrow \text{ та } d(x) = d(y)\}$,
$\boldsymbol{F}(=_{xy}) = \{d \in {}^{V}A \mid d(x)\downarrow, d(y)\downarrow \text{ та } d(x) \neq d(y)\}$.

Використовуючи предикати-індикатори εz, отримуємо наступні співвідношення:

$\boldsymbol{T}(\equiv_{xy}) = \boldsymbol{T}(=_{xy}) \cup (\boldsymbol{T}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{T}(\varepsilon y))$;
$\boldsymbol{F}(\equiv_{xy}) = \boldsymbol{F}(=_{xy}) \cup (\boldsymbol{T}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{F}(\varepsilon y)) \cup$
$\cup (\boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{T}(\varepsilon y)) =$
$= \boldsymbol{F}(=_{xy}) \cup ((\boldsymbol{T}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{T}(\varepsilon y)) \cap ((\boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{F}(\varepsilon y)))$;
$\boldsymbol{T}(=_{xy}) = \boldsymbol{T}(\equiv_{xy}) \cap \boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{F}(\varepsilon y)$;
$\boldsymbol{F}(=_{xy}) = \boldsymbol{F}(\equiv_{xy}) \cap \boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{F}(\varepsilon y)$.

Із визначень випливають такі співвідношення:

$\boldsymbol{T}(=_{xy}) \subset \boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{F}(\varepsilon y) \subset \boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{F}(\varepsilon y)$;
$\boldsymbol{F}(=_{xy}) \subset \boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{F}(\varepsilon y) \subset \boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{F}(\varepsilon y)$.

Предикати $=_{xy}$ є частковими однозначними, вони монотонні й еквітонні.

Предикати $\equiv_{xy}$ є тотальними однозначними.

Водночас $\equiv_{xy}$ немонотонні й неантитонні.

Справді, $\equiv_{xy}([z\mapsto a]) = T$, $\equiv_{xy}([z\mapsto a,\ x\mapsto a]) = F$, $\equiv_{xy}([z\mapsto a,\ x\mapsto a,\ y\mapsto a]) = T$.

Предикати $\equiv_{xy}$ можна подати через предикати $=_{xy}$ та предикати-індикатори εz.

Теорема 1. $\equiv_{xy} = (=_{xy} \& \neg\varepsilon x \& \neg\varepsilon y) \vee (\varepsilon x \& \varepsilon y)$.

Справді, маємо $\boldsymbol{T}(=_{xy}) \subset \boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{F}(\varepsilon y)$, звідки

$\boldsymbol{T}((=_{xy} \& \neg\varepsilon x \& \neg\varepsilon y) \vee (\varepsilon x \& \varepsilon y)) =$
$= \boldsymbol{T}(=_{xy} \& \neg\varepsilon x \& \neg\varepsilon y) \cup \boldsymbol{T}(\varepsilon x \& \varepsilon y) =$
$= (\boldsymbol{T}(=_{xy}) \cap \boldsymbol{T}(\neg\varepsilon x) \cap \boldsymbol{T}(\neg\varepsilon y)) \cup (\boldsymbol{T}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{T}(\varepsilon y)) =$
$= (\boldsymbol{T}(=_{xy}) \cap \boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{F}(\varepsilon y)) \cup (\boldsymbol{T}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{T}(\varepsilon y)) =$
$= \boldsymbol{T}(=_{xy}) \cup (\boldsymbol{T}(\varepsilon x) \cap \boldsymbol{T}(\varepsilon y)) = \boldsymbol{T}(\equiv_{xy})$.

маємо $\boldsymbol{F}(=_{xy}) \subset \boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{F}(\varepsilon y)$, звідки

$\boldsymbol{F}((=_{xy} \& \neg\varepsilon x \& \neg\varepsilon y) \vee (\varepsilon x \& \varepsilon y)) =$
$= \boldsymbol{F}(=_{xy} \& \neg\varepsilon x \& \neg\varepsilon y) \cap \boldsymbol{F}(\varepsilon x \& \varepsilon y) =$
$= (\boldsymbol{F}(=_{xy}) \cup \boldsymbol{F}(\neg\varepsilon x) \cup \boldsymbol{F}(\neg\varepsilon y)) \cap (\boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{F}(\varepsilon y)) =$
$= (\boldsymbol{F}(=_{xy}) \cup \boldsymbol{T}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{T}(\varepsilon y)) \cap (\boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{F}(\varepsilon y)) =$
$= (\boldsymbol{F}(=_{xy}) \cap (\boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{F}(\varepsilon y))) \cup ((\boldsymbol{T}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{T}(\varepsilon y)) \cap$
$\cap (\boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{F}(\varepsilon y))) = \boldsymbol{F}(=_{xy}) \cup ((\boldsymbol{T}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{T}(\varepsilon y)) \cap$
$\cap (\boldsymbol{F}(\varepsilon x) \cup \boldsymbol{F}(\varepsilon y))) = \boldsymbol{F}(\equiv_{xy})$.

Таким чином, вважаючи композиції $=_{xy}$ та εz базовими, маємо, що композиції $\equiv_{xy}$ є похідними.

Розглянемо властивості предикатів $\equiv_{xy}$ та $\equiv_{xy}$.

Твердження 6. Кожний предикат вигляду $\equiv_{xx}$ є тотожно істинним.

Справді, для кожного $d \in {}^{V}A$ маємо $\equiv_{xx}(d) = T$.

Твердження 7. Кожний предикат вигляду $=_{xx}$ є неспростовним.

Для кожного $d \in {}^{V}A$ маємо $=_{xx}(d) = T$ або $=_{xy}(d)\uparrow$.

Твердження 8. Для кожного $d \in {}^{V}A$ маємо $=_{xy}(d) = =_{xy}(d)$ та $\equiv_{xy}(d) = \equiv_{xy}(d)$.

Таким чином, для предикатів рівності $=_{xy}$ та $\equiv_{xy}$ маємо рефлексивність та симетричність.

Для предикатів $\equiv_{xy}$ маємо транзитивність:

Твердження 9. Для кожного $d \in {}^{V}A$ маємо: $\equiv_{xy}(d) = T$ та $\equiv_{yz}(d) = T \Rightarrow \equiv_{xz}(d) = T$.

Водночас для предикатів слабкої рівності $=_{xy}$ транзитивності по окремих даних вже немає.

Приклад 1. Для $d = [x\mapsto a, z\mapsto b]$, де $a \neq b$, маємо $=_{xy}(d)\uparrow$, $=_{yz}(d)\uparrow$, $=_{xz}(d) = F$. Це означає, що $=_{xy}$ та $=_{yz}$ на такому d неспростовні, водночас $=_{xz}$ на такому d хибний.

Для $\equiv_{xy}$ маємо властивість заміни рівних:

Твердження 10. Для кожних $P \in Pr^{A}$ та $d \in {}^{V}A$ маємо: якщо $\equiv_{xy}(d) = T$, то $R^{\bar{u},v}_{\bar{z},x}(P)(d) = R^{\bar{u},v}_{\bar{z},y}(P)(d)$

Водночас для предикатів слабкої рівності заміни рівних за окремими даними вже немає.

Приклад 2. Для $d = [x\mapsto a, z\mapsto b]$ маємо $=_{xy}(d)\uparrow$, тобто $=_{xy}$ на такому d неспростовний. Задамо $P([z\mapsto b, v\mapsto a]) = T$ та $P([z\mapsto b]) = F$, тоді

маємо $R_x^v(P)(d) = T$ та $R_y^v(P)(d) = F$.

Предикати рівності $=_{xy}$ та $\equiv_{xy}$ також будемо позначати традиційним способом як $x = y$ та $x \equiv y$.

3. Семантичні властивості реномінативних логік

Семантичною основою реномінативних логік є композиційні системи *V*-квазіарних предикатів вигляду ($^V\!A$, Pr^A, $\boldsymbol{C}$). На базовому рівні РНЛ множина $\boldsymbol{C}$ задається базовими композиціями $\neg$, $\vee$, $\mathrm{R}_{\bar{x}}^{\bar{v}}$, на підрівні РНЛР – базовими композиціями $\neg$, $\vee$, $\mathrm{R}_{\bar{x}}^{\bar{v}}$, $\equiv_{xy}$; на підрівні РНЛСР – базовими композиціями $\neg$, $\vee$, $\mathrm{R}_{\bar{x}}^{\bar{v}}$, $=_{xy}$. Кожна така композиційна система ($^V\!A$, Pr^A, $\boldsymbol{C}$) визначає дві алгебри: композиційну алгебру квазіарних предикатів (Pr^A, $\boldsymbol{C}$) та алгебру (алгебраїчну систему) даних із квазіарними предикатами (A, Pr^A). Побудова композиційної предикатної алгебри визначає мову логіки: терми такої алгебри є формулами мови.

Зв'язок алгебри даних і композиційної предикатної алгебри відбувається шляхом виділення та позначення в алгебрі даних базових предикатів, із яких за допомогою композицій будуються складніші предикати. Таким чином, виділяємо множину базових предикатів та множину *Ps* для їх позначення (іменування), при цьому задаємо тотальне однозначне відображення $I : Ps \to Pr^A$. Імена базових предикатів традиційно називають предикатними символами (ПС), множину *Ps* предикатних символів називають сигнатурою.

Мови реномінативної логіки. Алфавіт мови РНЛ складається із символів базових композицій $\neg$, $\vee$, $R_{\bar{x}}^{\bar{v}}$, множини *Ps* предикатних символів (сигнатура мови) та множини *V* предметних імен.

При зафіксованій множині базових композицій мови РНЛ відрізняються сигнатурою і способами запису основних конструкцій мови – формул. Використовуємо префіксну форму запису.

Індуктивне визначення формул мови РНЛ:

1) кожний $p \in Ps$ є формулою; такі формули *атомарні*;

2) нехай Φ та Ψ – формули; тоді $\neg\Phi$, $\vee\Phi\Psi$, $R_{\bar{x}}^{\bar{v}}\Phi$ – формули.

Алфавіт мови РНЛР відрізняється від алфавіту мови РНЛ додаванням $\equiv_{xy}$ до символів базових композицій. При цьому до індуктивного визначення множини формул додається такий пункт:

$1_{\equiv}$) кожний $\equiv_{xy}$, де $x, y \in V$, є формулою; такі формули атомарні.

Алфавіт мови РНЛРС відрізняється від алфавіту мови РНЛ додаванням $=_{xy}$ до символів базових композицій. При цьому до індуктивного визначення множини формул додається пункт:

$1_{=}$) кожний $=_{xy}$, де $x, y \in V$, є формулою; такі формули атомарні.

Формули $\vee\Phi\Psi$, $\vee\neg\Phi\Psi$, $\neg\vee\neg\vee\neg\Phi\Psi\neg\vee\neg\Psi\Phi$, $\neg\vee\neg\Phi\neg\Psi$ позначаємо відповідно $\Phi\vee\Psi$ $\Phi\to\Psi$, $\Phi\leftrightarrow\Psi$, $\Phi\&\Psi$. Такі скорочення також називатимемо формулами, для їх запису використовуємо символи похідних композицій $\to$, &, $\leftrightarrow$ (див. [1]).

Інтерпретуємо мови РНЛ на композиційних системах квазіарних предикатів реномінативного рівня. Відображення інтерпретації $I : Fr \to Pr^A$, де *Fr* – множина формул, є продовженням відображення $I : Ps \to Pr^A$ згідно побудови формул із простіших за допомогою символів композицій:

$I(\neg\Phi) = \neg(I(\Phi))$, $I(\vee\Phi\Psi) = \vee(I(\Phi), I(\Psi))$,

$I(R_{\bar{x}}^{\bar{v}}\Phi) = \mathrm{R}_{\bar{x}}^{\bar{v}}(I(\Phi))$.

Для мови РНЛР додатково маємо: $I(\equiv_{xy}) = \equiv_{xy}$. Для мови РНЛРС додатково маємо: $I(=_{xy}) = =_{xy}$.

Відображення *I* прив'язує алгебраїчну систему (АС) даних (A, Pr^A) до мови логіки. Отримуємо об'єкти вигляду $\boldsymbol{A} = ((A, Pr^A), I)$ – АС з доданою сигнатурою (мовою) [3], які скорочено позначаємо (A, I). Кожна така $\boldsymbol{A}$ задає композиційну систему ($^V\!A$, Pr^A, C), тому АС з доданою сигнатурою є семантичними моделями мови.

Предикат $I(\Phi)$, який є значенням формули Φ при інтерпретації на $\boldsymbol{A} = (A, I)$, позначаємо Φ_A.

Ім'я $x \in V$ (строго) неістотне для формули Φ, якщо для кожної моделі мови $\boldsymbol{A}$ ім'я x неістотне для предиката Φ_A.

Формула Φ частково істинна при інтерпретації на моделі мови $\boldsymbol{A}$, або $\boldsymbol{A}$-неспростовна, якщо Φ_A – частково істинний (неспростовний) предикат. Цей факт позначаємо $\boldsymbol{A} \models \Phi$.

Формула Φ частково істинна, або неспростовна (позначаємо $\models \Phi$), якщо Φ є $\boldsymbol{A}$-неспростовною на кожній моделі мови $\boldsymbol{A}$.

Формула Φ виконувана при інтерпретації на $\boldsymbol{A}$, або $\boldsymbol{A}$-виконувана, якщо Φ_A – виконуваний предикат. Формула Φ виконувана, якщо Φ $\boldsymbol{A}$-виконувана для кожної моделі мови $\boldsymbol{A}$.

Подібним чином даємо визначення формули:

– тотожно істинної на $\boldsymbol{A}$ та тотожно істинної;

– тотожно хибної на $\boldsymbol{A}$ та та тотожно хибної.

Розширенням РНЛ, РНЛР, РНЛРС та ε-РНЛ, ε-РНЛР, ε-РНЛРС є відповідні класи реномінативних логік з неістотними предметними іменами.

Для кожного $p \in Ps$ множину синтетично неістотних предметних імен задамо за допомогою тотальної функції $\nu : Ps \to 2^V$, яка далі продовжується до $\nu : Fr \to 2^V$ (див. [2]). При цьому маємо

$\nu(\varepsilon z) = V\backslash\{z\}$, $\nu(\equiv_{xy}) = \nu(=_{xy}) = V\backslash\{x,y\}$. Множина тотально неістотних імен – це $V_T = \bigcap_{p\in Ps} \nu(p)$.

Для КНЛ з неістотними предметними іменами постулюємо нескінченність V_T. Класи таких логік, які є розширеннями класів РНЛ, РНЛР, РНЛРС, позначаємо РНЛ_U, РНЛР_U, РНЛРС_U.

Класи РНЛ з явно заданими предикатами-індикаторами наявності значення для змінних, які є розширеннями класів РНЛ_U, РНЛР_U, РНЛРС_U, позначаємо ε-РНЛ_U, ε-РНЛР_U, ε-РНЛРС_U.

Логічні наслідки в РНЛ. Уточнення фундаментального поняття логічного слідування в КНЛ за допомогою відношень логічного наслідку описано в [2]. Спочатку задаємо відношення $_A|=_{Cl}$, $_A|=_{Cm}$, $_A|=_T$, $_A|=_F$, $_A|=_{TF}$ наслідку для двох формул при інтерпретації на фіксованій моделі мови $\boldsymbol{A}$:

$\Phi\ _A|=_{Cl} \Psi \Leftrightarrow \boldsymbol{T}(\Phi_A)\cap\boldsymbol{F}(\Psi_A) = \varnothing$;

$\Phi\ _A|=_{Cm} \Psi \Leftrightarrow \boldsymbol{F}(\Phi_A)\cup\boldsymbol{T}(\Psi_A) = {}^V A$;

$\Phi\ _A|=_T \Psi \Leftrightarrow \boldsymbol{T}(\Phi_A)\subseteq\boldsymbol{T}(\Psi_A)$;

$\Phi\ _A|=_F \Psi \Leftrightarrow \boldsymbol{F}(\Psi_A)\subseteq\boldsymbol{F}(\Phi_A)$;

$\Phi\ _A|=_{TF} \Psi \Leftrightarrow \boldsymbol{T}(\Phi_A)\subseteq\boldsymbol{T}(\Psi_A)$ та $\boldsymbol{F}(\Psi_A)\subseteq\boldsymbol{F}(\Phi_A)$.

Відповідні відношення логічного наслідку $|=_{Cl}$, $|=_{Cm}$, $|=_T$, $|=_F$, $|=_{TF}$ визначаємо за такою схемою:

$\Phi\ |=_* \Psi \Leftrightarrow \Phi\ _{\boldsymbol{A}}|=_* \Psi$ для кожної моделі мови $\boldsymbol{A}$.

Для неокласичної семантики (логіки часткових однозначних предикатів) можна розглядати відношення $|=_T$, $|=_F$, $|=_{TF}$, $|=_{Cl}$; для дуальної до неокласичної пересиченої семантики (логіки тотальних неоднозначних предикатів) можна розглядати $|=_T$, $|=_F$, $|=_{TF}$, $|=_{Cm}$. Для загальної семантики (логіки часткових неоднозначних предикатів) природно розглядати лише $|=_{TF}$ (див. [2]).

Відношення еквівалентності в моделі мови $\boldsymbol{A}$ $_A\sim_{Cl}$, $_A\sim_{Cm}$, $_A\sim_F$, $_A\sim_T$, $_A\sim_{TF}$ та логічної еквівалентності $\sim_{Cl}$, $\sim_{Cm}$, $\sim_T$, $\sim_F$, $\sim_{TF}$ визначаємо за схемою:

$\Phi\ _A\sim_* \Psi$, якщо $\Phi\ _A|=_* \Psi$ та $\Psi\ _A|=_* \Phi$;

$\Phi \sim_* \Psi$, якщо $\Phi\ |=_* \Psi$ та $\Psi\ |=_* \Phi$.

Для кожної моделі мови $\boldsymbol{A}$ маємо: $\Phi\ _A\sim_{TF} \Psi \Leftrightarrow$ $\Leftrightarrow \boldsymbol{T}(\Phi_A) = \boldsymbol{T}(\Psi_A)$ та $\boldsymbol{F}(\Psi_A) = \boldsymbol{F}(\Phi_A)$, тобто $\Phi_A = \Psi_A$.

Відношення логічного наслідку поширюються [2] на множини формул. Спочатку задамо відношення наслідку для множин формул Γ та Δ при інтерпретації на моделі мови $\boldsymbol{A}$:

$\Gamma\ _A|=_{Cl} \Delta$, якщо $\bigcap_{\Phi\in\Gamma} T(\Phi_A) \cap \bigcap_{\Psi\in\Delta} F(\Psi_A) = \varnothing$;

$\Gamma\ _A|=_{Cm} \Delta$, якщо $\bigcup_{\Phi\in\Gamma} F(\Phi_A) \cup \bigcup_{\Psi\in\Delta} T(\Psi_A) = {}^V A$;

$\Gamma\ _A|=_T \Delta$, якщо $\bigcap_{\Phi\in\Gamma} T(\Phi_A) \subseteq \bigcup_{\Psi\in\Delta} T(\Psi_A)$;

$\Gamma\ _A|=_F \Delta$, якщо $\bigcap_{\Psi\in\Delta} F(\Psi_A) \subseteq \bigcup_{\Phi\in\Gamma} F(\Phi_A)$;

$\Gamma\ _A|=_{TF} \Delta$, якщо $\Gamma\ _A|=_F \Delta$ та $\Gamma\ _A|=_T \Delta$.

Відношення логічного наслідку для множин формул $|=_{Cl}$, $|=_{Cm}$, $|=_T$, $|=_F$, $|=_{TF}$ задаємо за схемою:

$\Gamma\ |=_* \Delta$, якщо $\Gamma\ _A|=_* \Delta$ для кожної моделі мови $\boldsymbol{A}$.

Основні властивості відношень логічного наслідку наведені в [2].

Семантичні властивості РНЛ. На основі відповідних властивостей предикатів отримуємо такі властивості формул, пов'язані з реномінаціями.

RT) $R^{z,\bar v}_{z,\bar x}(\Phi) \sim_{TF} R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)$. Зокрема, $R^{z}_{z}(\Phi) \sim_{TF} \Phi$.

R¬) $R^{\bar v}_{\bar x}(\neg\Phi) \sim_{TF} \neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)$.

R∨) $R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi \vee \Psi) \sim_{TF} R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi) \vee R^{\bar v}_{\bar x}(\Psi)$.

Подібним чином записуємо R&, R→, R↔.

RR) $R^{\bar v}_{\bar x}(R^{\bar w}_{\bar y}(\Phi)) \sim_{TF} R^{\bar v}_{\bar x} \circ R^{\bar w}_{\bar y}(\Phi)$.

RU) Нехай $y\in V$ неістотне для Φ. Тоді $R^{y,\bar v}_{z,\bar x}(\Phi) \sim_{TF} R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)$.

Властивості реномінації предикатів-індикаторів:

Rεv) $R^{\bar x, z}_{\bar y, u}(\varepsilon z) \sim_{TF} \varepsilon u$; зокрема, $R^{z}_{u}(\varepsilon z) \sim_{TF} \varepsilon u$;

Rε) $R^{\bar x}_{\bar y}(\varepsilon z) \sim_{TF} \varepsilon z$, якщо $z \notin \{\bar x\}$.

Для предикатів слабкої рівності маємо:

Rfs) рефлексивність: $|= x = x$;

Sms) симетричність: $|= x = y \leftrightarrow y = x$;

Trs) транзитивність: $|= x = y \to y = z \to x = z$;

EΦs) заміна рівних:

$|= x = y \to (R^{\bar u,v}_{z,x}(\Phi) \leftrightarrow R^{\bar u,v}_{z,y}(\Phi))$.

Водночас (приклади 1, 2) для предикатів слабкої рівності властивості транзитивності та заміни рівних при розгляді на окремих даних – невірні.

Для предикатів строгої рівності зазначені властивості формулюються в сильнішій формі:

Rf) кожний $x \equiv x$ тотожно істинний;

Sm) $x \equiv y \sim_{TF} y \equiv x$;

Tr) для кожних моделі мови (A, I) та $d\in {}^V A$ маємо: $x \equiv y_A(d) = T$ та $y \equiv z_A(d) = T \Rightarrow x \equiv z_A(d) = T$;

EΦ) для кожних моделі мови (A, I) та $d\in {}^V A$ маємо: $x \equiv y_A(d) = T \Rightarrow R^{\bar u,v}_{z,x}(\Phi)_A(d) = R^{\bar u,v}_{z,y}(\Phi)_A(d)$.

У відповідних семантиках маємо такі теореми еквівалентності та заміни еквівалентних.

Теорема 2 (еквівалентності) Нехай Φ', отримана з Φ заміною деяких входжень $\Phi_1, ..., \Phi_n$ на $\Psi_1, ..., \Psi_n$. Якщо $\Phi_1 \sim_* \Psi_1$, ..., $\Phi_n \sim_* \Psi_n$, то $\Phi \sim_* \Phi'$.

Тут $\sim_*$ – одне з $\sim_{Cl}$, $\sim_{Cm}$, $\sim_{TF}$. Водночас [4] для відношень $\sim_T$ та $\sim_F$ теорема 2 невірна.

Теорема 3 (заміни еквівалентних). Нехай $\Phi \sim_{TF} \Psi$. Тоді маємо: $\Phi, \Gamma |=_* \Delta \Leftrightarrow \Psi, \Gamma |=_* \Delta$ та $\Gamma |=_* \Delta, \Phi \Leftrightarrow \Gamma |=_* \Delta, \Psi$.

Тут і надалі, якщо інше окремо не зазначено, $|=_*$ – одне із $|=_{Cl}$, $|=_{Cm}$, $|=_T$, $|=_F$, $|=_{TF}$.

4. Властивості відношень логічного наслідку для множин формул РНЛ

Властивості пропозиційного рівня:

U) нехай $\Gamma\subseteq\Lambda$ та $\Delta\subseteq\Sigma$, тоді $\Gamma\models_*\Delta\Rightarrow\Lambda\models_*\Sigma$;

C) якщо $\Gamma\cap\Delta\neq\varnothing$, то $\Gamma\models_*\Delta$;

CL) $\Phi,\neg\Phi,\Gamma\models_*\Delta$

(для неокласичної семантики $\models_*$ – це $\models_T$ або $\models_{Cl}$; для пересиченої – $\models_F$ або $\models_{Cm}$);

CR) $\Gamma\models_*\Delta,\Phi,\neg\Phi$

(для неокласичної семантики $\models_*$ – це $\models_F$ або $\models_{Cl}$; для пересиченої – $\models_T$ або $\models_{Cm}$);

CLR) $\Phi,\neg\Phi,\Gamma\models_{TF}\Delta,\Psi,\neg\Psi$ (для неокласичної або для пересиченої семантики).

Властивості *C*, *CL*, *CR*, *CLR* гарантують наявність логічних наслідків у відповідних семантиках. Для $\models_{Cl}$ та $\models_{Cm}$ *CL*, *CR*, *CLR* зводяться до *C*.

$\neg\neg_L)$ $\neg\neg\Phi,\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\Phi,\Gamma\models_*\Delta$;

$\neg\neg_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg\neg\Phi\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\Phi$;

$\vee_L)$ $\Phi\vee\Psi,\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\Phi,\Gamma\models_*\Delta$ та $\Psi,\Gamma\models_*\Delta$;

$\vee_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\Phi\vee\Psi\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\Phi,\Psi$;

$\neg\vee_L)$ $\neg(\Phi\vee\Psi),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\neg\Phi,\neg\Psi,\Gamma\models_*\Delta$;

$\neg\vee_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg(\Phi\vee\Psi)\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\neg\Phi$ та $\Gamma\models_*\Delta,\neg\Psi$.

Для $\models_{Cl}$ та $\models_{Cm}$ також маємо:

$\neg_L)$ $\neg\Phi,\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\Phi$;

$\neg_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg\Phi\Leftrightarrow\Phi,\Gamma\models_*\Delta$.

Для відношень $\models_T$, $\models_F$, $\models_{TF}$ властивості $\neg_L$ і $\neg_R$ вже невірні [2].

Властивості, пов'язані з реномінацією:

$RT_L)$ $R^{z,\bar v}_{z,\bar x}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta$;

$RT_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,R^{z,\bar v}_{z,\bar x}(\Phi)\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)$;

$\neg RT_L)$ $\neg R^{z,\bar v}_{z,\bar x}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta$;

$\neg RT_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{z,\bar v}_{z,\bar x}(\Phi)\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)$;

$RR_L)$ $R^{\bar v}_{\bar x}(R^{\bar w}_{\bar y}(\Phi)),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow R^{\bar v}_{\bar x}\circ^{\bar w}_{\bar y}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta$;

$RR_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,R^{\bar v}_{\bar x}(R^{\bar w}_{\bar y}(\Phi))\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,R^{\bar v}_{\bar x}\circ^{\bar w}_{\bar y}(\Phi)$;

$\neg RR_L)$ $\neg R^{\bar v}_{\bar x}(R^{\bar w}_{\bar y}(\Phi)),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow\neg R^{\bar v}_{\bar x}\circ^{\bar w}_{\bar y}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta$;

$\neg RR_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{\bar v}_{\bar x}(R^{\bar w}_{\bar y}(\Phi))\Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{\bar v}_{\bar x}\circ^{\bar w}_{\bar y}(\Phi)$;

$R\neg_L)$ $R^{\bar v}_{\bar x}(\neg\Phi),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta$;

$R\neg_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,R^{\bar v}_{\bar x}(\neg\Phi)\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)$;

$\neg R\neg_L)$ $\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\neg\Phi),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta$;

$\neg R\neg_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\neg\Phi)\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)$;

$R\vee_L)$ $R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi\vee\Psi),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)\vee R^{\bar v}_{\bar x}(\Psi),\Gamma\models_*\Delta$;

$R\vee_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)\vee R^{\bar v}_{\bar x}(\Psi)$;

$\neg R\vee_L)$ $\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi\vee\Psi),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow$ **Ошибка! Ошибка связи.** $\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi),\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Psi),\Gamma\models_*\Delta$;

$\neg R\vee_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi\vee\Psi)\Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)$ та $\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Psi)$.

Для класів $РНЛ_U$, $РНЛР_U$, $РНЛРС_U$ та ε-$РНЛ_U$, ε-$РНЛР_U$, ε-$РНЛРС_U$ також маємо (тут $y\in\nu(\Phi)$):

$\Phi N_L)$ $R^{y,\bar v}_{z,\bar x}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta$;

$\Phi N_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,R^{y,\bar v}_{z,\bar x}(\Phi)\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)$;

$\neg\Phi N_L)$ $\neg R^{y,\bar v}_{z,\bar x}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta$;

$\neg\Phi N_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{y,\bar v}_{z,\bar x}(\Phi)\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{\bar v}_{\bar x}(\Phi)$.

Для класів ε-РНЛ, ε-РНЛР, ε-РНЛРС, ε-$РНЛ_U$, ε-$РНЛР_U$, ε-$РНЛРС_U$ з явно заданими предикатами-індикаторами εz додатково маємо:

$\neg\varepsilon_L)$ $\neg\varepsilon y,\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\varepsilon y$;

$\neg\varepsilon_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg\varepsilon y\Leftrightarrow\varepsilon y,\Gamma\models_*\Delta$;

$R\varepsilon_L)$ $R^{\bar x}_{\bar y}(\varepsilon z),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\varepsilon z,\Gamma\models_*\Delta$

$R\varepsilon_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,R^{\bar x}_{\bar y}(\varepsilon z)\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\varepsilon z$;

$\neg R\varepsilon_L)$ $\neg R^{\bar x}_{\bar y}(\varepsilon z),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\neg\varepsilon z,\Gamma\models_*\Delta$;

$\neg R\varepsilon_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{\bar x}_{\bar y}(\varepsilon z)\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\neg\varepsilon z$.

Для $R\varepsilon_L$, $R\varepsilon_R$ та $\neg R\varepsilon_L$, $\neg R\varepsilon_R$ умова: $z\notin\{\bar x\}$.

$R\varepsilon v_L)$ $R^{\bar x,z}_{\bar y,u}(\varepsilon z),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\varepsilon u,\Gamma\models_*\Delta$;

$R\varepsilon v_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,R^{\bar x,z}_{\bar y,u}(\varepsilon z)\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\varepsilon u$;

$\neg R\varepsilon v_L)$ $\neg R^{\bar x,z}_{\bar y,u}(\varepsilon z),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\neg\varepsilon u,\Gamma\models_*\Delta$;

$\neg R\varepsilon v_R)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg R^{\bar x,z}_{\bar y,u}(\varepsilon z)\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,\neg\varepsilon u$.

Для $\models_{Cl}$ та $\models_{Cm}$ можна знімати заперечення, переносячи формулу з лівої частини відношення у праву й навпаки, тому для $\models_{Cl}$ та $\models_{Cm}$ властивості із зовнішнім запереченням на реномінацію є похідними.

Для предикатів строгої рівності маємо наступні властивості:

$E\varepsilon)$ $x\equiv y,\varepsilon x,\Gamma\models_*\Delta,\varepsilon y$;

$Rf)$ $\Gamma\models_*\Delta,x\equiv x$ (випливає з того, що предикат $x\equiv x$ тотожно істинний);

$\neg E)$ $\Gamma\models_*\Delta,\neg x\equiv y\Leftrightarrow x\equiv y,\Gamma\models_*\Delta$ та $\neg x\equiv y,\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow\Gamma\models_*\Delta,x\equiv y$;

$Sm)$ $x\equiv y,\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow x\equiv y,y\equiv x,\Gamma\models_*\Delta$;

$Tr)$ $x\equiv y,y\equiv z,\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow x\equiv y,y\equiv z,x\equiv z,\Gamma\models_*\Delta$;

$E\Phi_L)$ $x\equiv y,R^{\bar u,z}_{\bar v,x}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta\Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow x\equiv y,R^{\bar u,z}_{\bar v,x}(\Phi),R^{\bar u,z}_{\bar v,y}(\Phi),\Gamma\models_*\Delta$;

$\text{E}\Phi_{\text{R}})\ x \equiv y, \Gamma \models_* \Delta, R^{\bar{u},z}_{\bar{v},x}(\Phi) \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow x \equiv y, \Gamma \models_* \Delta, R^{\bar{u},z}_{\bar{v},x}(\Phi), R^{\bar{u},z}_{\bar{v},y}(\Phi).$

Властивості Eε та Rf гарантують наявність логічних наслідків у відповідних семантиках.

Для предикатів слабкої рівності відповідні властивості істотно ускладнюються, вони формулюються по-різному для відношень $\models_{Cl}$, $\models_{T}$, $\models_{F}$, $\models_{TF}$ (див. [6]).

Розглянуті властивості відношень логічного наслідку є семантичною основою побудови для запропонованих класів РНЛ з рівністю відповідних числень секвенційного типу.

Висновки

Досліджено нові класи програмно-орієнтованих логічних формалізмів – реномінативні логіки квазіарних предикатів з рівністю. Вони займають проміжне становище між пропозиційною логікою та першопорядковими композиційно-номінативними логіками і є розширенням звичайних реномінативних логік. Запропоновано дві різновидності таких логік – із предикатами строгої рівності $\equiv_{xy}$ та з предикатами слабкої рівності $=_{xy}$. Для цих різновидностей розглянуто підкласи з виділеними тотально неістотними предметними іменами (змінними) та підкласи з явно заданими спеціальними предикатами-індикаторами наявності значення для змінних. Наведено властивості предикатів $\equiv_{xy}$ та $=_{xy}$. Показано, що $\equiv_{xy}$ можна подати через $=_{xy}$ та предикати-індикатори. Розглянуто семантичні моделі та мови пропонованих логік, досліджено їх семантичні властивості. Описано властивості відношень логічного наслідку для множин формул в реномінативних логіках часткових однозначних, тотальних неоднозначних та часткових неоднозначних предикатів. На базі цих властивостей планується побудова для запропонованих класів реномінативних логік відповідних числень секвенційного типу.

Список використаних джерел

1. *Нікітченко М.С.* Математична логіка та теорія алгоритмів / М.С. Нікітченко, С.С. Шкільняк. – Київ: ВПЦ Київський університет, 2008. – 528 с.
2. *Нікітченко М.С.* Прикладна логіка / М.С. Нікітченко, С.С. Шкільняк. – Київ: ВПЦ Київський університет, 2013. – 278 с.
3. *Kleene S. C.* Mathematical Logic / S. C. Kleene. – New York: John Wiley & Sons. – 1967. – 398 p.
4. *Нікітченко М.С.* Композиційно-номінативні логіки із спеціальними предикатами наявності значення для змінних / М.С. Нікітченко, С.С. Шкільняк // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки. – 2013. – Спецвипуск. – С. 128–133.
5. *Шкільняк С.С.* Числення секвенційного типу для чистих першопорядкових логік квазіарних предикатів / С.С. Шкільняк // Наукові записки НаУКМА. Том 151. Комп'ютерні науки. –2013. – С. 24–31.
6. *Шкільняк С.С.* Побудова секвенційних числень логік квазіарних предикатів першого порядку / С.С. Шкільняк // Штучний інтелект. – 2013. – № 4. – С. 62–73.

References

1. NIKITCHENKO, M. and SHKILNIAK, S. (2008). *Matematycna lohika ta teoria alhorytmiv*. Kyiv: VPC Kyivskyi Universytet.
2. NIKITCHENKO, M. and SHKILNIAK, S. (2013). *Prykladna lohika*. Kyiv: VPC Kyivskyi Universytet.
3. Kleene, S. (1967). *Mathematical Logic*. New York: John Wiley & Sons.
4. NIKITCHENKO, M. and SHKILNIAK, S. (2013). Composition-nominative logics with special variable definedness predicates. In *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physics & Mathematics*. Spetsvypusk, P. 128–133.
5. SHKILNIAK, S. (2013). Sequent calculi for pure first-order logics of quasi-ary predicates. In *Scientific Notes of NaUKMA. Vol. 151. Computer Science*. P. 24–31.
6. SHKILNIAK, S. (2013). Construction of Sequent Calculi for First-order Logics of Quasiary Predicates. In *Artificial Intelligence*. № 4, P. 62–73.

Надійшла до редколегії 29.05.14

УДК 517.96

Шушарін Ю. В.[1], к. ф.-м. н., старший викладач

Рекурентні рівняння для характеристичних функцій розв'язків лінійних різницевих рівнянь з випадковими коефіцієнтами

[1] Київський національний економічний університет імені Вадима Гетьмана, 03680, м. Київ, пр-т Перемоги, 54/1
e-mail: shusharin@meta.ua

Shusharin Y.V.[1], Ph.D., senior teacher

Recurrent equation for characteristic functions solutions of linear difference equations with random coefficients

[1] National Economic University named after Vadym Hetman, 03680, Kyiv, Prospect Peremogy 54/1

e-mail: shusharin@meta.ua

Для перетворень Фур'є частинних розподілів розв'язків векторних різницевих лінійних рівнянь з випадковими коефіцієнтами, що є ланцюгами Маркова із скінченним числом станів, виводяться рекурентні рівняння.

Ключові слова: перетворення Фур'є, різницеве рівняння, випадкові коефіцієнти, ланцюг Маркова.

For the Fourier transform partial distributions of solutions vector linear difference equations with random coefficients, which is a Markov chain with a finite number of states, derived recurrence equations. In cases where there is partial density distributions shown that a recurrence equation for the Fourier transform of distributions may receive partial recursive equation for the density. We study also the case when solutions of difference equations with random coefficients exist moments. We also show that a recurrence equations Fourier transform partial distributions of that solutions resulting equation for the first order moment of sequences and recurrence equation for the dispersion matrices. The work received partial recursive equation for characteristic functions of vector sequence of random variables that are solutions of linear difference equations with Markov coefficients and recurrence equation for partial points of the first and second order vector quantities that satisfy a linear difference equation of the general form of the coefficients dependent on two consecutive values of random variables is a Markov chain with a finite number of states.

Key Words: Fourier transform, difference equation, random coefficients, Markov chain.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Хусаінов Д.Я.

Дослідженням процесів, що описуються різницевими рівняннями з випадковими коефіцієнтами займалися К.Г. Валеєв [5], І.І. Гіхман, І.Л. Джалладова, Д.Г. Коренівський [1] та інші. В роботах К.Г. Валеєва одержані рекурентні рівняння для частинних моментів першого та другого порядків для деяких лінійних рівнянь.

В даній роботі досліджуються проблеми побудови рекурентних рівнянь для загальних лінійних рівнянь з випадковими коефіцієнтами. Показано, що для характеристичних функцій лінійних різницевих рівнянь мають місце певні рекурентні співвідношення, які можна використати для отримання рекурентних рівнянь моментних функцій випадкових векторів. Лінійні диференціальні і різницеві рівняння з випадковими коефіцієнтами розглядались в роботах К.Г. Валеєва [5], В.С Королюка [2], Д.Г. Коренівського [1]. Для лінійних різницевих рівнянь з марковськими коефіцієнтами отримані рекурентні рівняння для умовних характеристичних функцій, показано, що ці рекурентні рівняння можна використати для отримання рекурентних рівнянь для моментних функцій першого та другого порядків. Аналогічним чином можна отримати рекурентні рівняння для моментів вищих порядків.

Нехай послідовність $X_n \in R^m$ знаходиться із розв'язку різницевого рівняння

$$X_{n+1} = A(\xi_{n+1}, \xi_n) X_n, \qquad X_0 = \zeta_0, \qquad (1)$$

де $\xi_k, k = 0,...,n,$ – послідовність випадкових величин, що приймають скінчене число значень $\theta_1,...,\theta_q$, і утворюють марковський ланцюг з ймовірностями переходу

© Ю.В. Шушарін, 2014

$\pi_{ks} = P\{\xi_n = \theta_k \,|\, \xi_{n-1} = \theta_s\}$, ζ_0 – випадковий вектор із R^m, що не залежить від величин $\xi_k, k = 0,...,n$, $A(\theta_k, \theta_s)$ – відомі матриці.

Нехай

$$F_k(n,x) = P\{X_n < x, \xi_n = \theta_k\},$$

де x – вектор із R^m з компонентами $x_1,...,x_m$, а під подією $\{X_n < x\}$ будемо розуміти подію $\{X_{n_1} < x_1,..., X_{n_m} < x_m\}$, X_{n_i} – компоненти вектора X_n.

Перетворення Фур'є функції $F_k(n,x)$ позначимо через $\varphi_k(n,t)$, тобто

$$\varphi_k(n,t) = \int_{R^m} \exp\{i(t,x)\}\, dF_k(n,x). \qquad (2)$$

Нехай далі послідовність X_n є розв'язком різницевого рівняння

$$X_{n+1} = A(\xi_{n+1}, \xi_n) X_n + \sum_{j=1}^{r} B_j(\xi_{n+1}, \xi_n) \eta_{jn} X_n, \qquad (3)$$
$$X_0 = \zeta_0,$$

де ξ_n – випадкові величини, такі ж як і в (1). Вектори $\eta_k, k = 0,...,n$, де $\eta_k = (\eta_{1_k},...,\eta_{r_k})^*$, є послідовність незалежних величин, що не залежать від ξ_k і від випадкового вектора ζ_0. $A(\theta_k, \theta_s), B_j(\theta_k, \theta_s)$ – матриці розмірності $m \times m$.

Теорема 1. Для перетворення Фур'є функції $P\{X_n < x, \xi_n = \theta_k\} = F_k(n,x)$ має місце рекурентне рівняння

$$\varphi_k(n+1,t) = \sum_{s=1}^{q} \pi_{ks} \int_{R^r} \varphi_s\left(n, (A_{ks}^* t + \sum_{j=1}^{r} B_{j_{ks}}^* u_j)t\right) dF_n(u_1,...,u_r), \qquad (4)$$

де $A_{ks} = A(\theta_k, \theta_s)$, $B_{jks} = B_j(\theta_k, \theta_s)$, $F_k(u_1,...,u_r) = P\{\eta_{1_n} < u_1,..., \eta_{r_n} < u_r\}$.

Доведення.

Оскільки

$$P\{X_{n+1} < x, \xi_{n+1} = \theta_k\} = \sum_{j=1}^{q} P\{X_{n+1} < x, \xi_{n+1} = \theta_k, \xi_n = \theta_s\} =$$

$$= \sum_{s=1}^{q} \int_{R^r} P\left\{(A(\xi_n, \xi_{n+1}) + \sum_{j=1}^{r} B_j(\xi_n, \xi_{n+1}) u_j) X_n, \xi_{n+1} = \theta_k, \xi_n = \theta_s\right\} dF_n(u_1,...,u_r),$$

а

$$P\left\{(A(\xi_n, \xi_{n+1}) + \sum_{j=1}^{r} B_j(\xi_n, \xi_{n+1}) u_j) X_n < x, \xi_{n+1} = \theta_k, \xi_n = \theta_s\right\} = \pi_{ks} P\left\{(A_{ks} + \sum_{j=1}^{r} B_{j_{ks}} u_j) X_n < x\right\},$$

то

$$F_k(n+1,x) = \sum_{s=1}^{q} \pi_{ks} \int_{R^r} P\{\overline{A}_{ks} X_n < x\} dF_n(u_1,...,u_r),$$

де $\overline{A}_{ks} = A_{ks} + \sum_{j=1}^{r} B_{j_{ks}} u_j$, звідки

$$\varphi_k(n+1,x) = \sum_{s=1}^{q} \pi_{ks} \int_{R^r} \varphi_k(n, \overline{A}_{ks}^* t) dF_n(u_1,...,u_r),$$

що і потрібно було показати.

Припустимо, що G – вимірна множина із простору R^m, а функція $\mu_{nk}(G) = P\{x_n \in G, \xi_n = \theta_k\}$ абсолютно неперервна відносно міри Лебега для всякого n і $k = \overline{1,q}$. Тоді для міри $\mu_{nk}(G)$ має місце рівність

$$\mu_{nk}(G) = \int_G f_k(n,x) dx,$$

де $f_k(n,x)$ – вимірні за Лебегом функції, які назвемо частинними щільностями розподілу векторної величини X_n. Зауважимо, що якщо існують частинні щільності розподілу, то існує і щільність розподілу вектора X_n, яку позначимо через $f(n,x)$, причому має місце рівність $f(n,x) = \sum_{k=1}^{q} f_k(n,x)$.

Теорема 2. Припустимо, що існують частинні щільності розподілу. Тоді вони задовольняють рекурентному рівнянню

$$f_k(n+1,x) = \sum_{s=1}^{q} \pi_{ks} \int_{R^r} f_s(n, \overline{A}_{ks}^{-1} x) \left|\det \overline{A}_{ks}\right| dF_n(u_1,...,u_r). \qquad (5)$$

Доведення.

Оскільки

$$\varphi_k(n+1,t) = \int_{R^m} \exp\{i(t,x)\} f_k(n+1,x) dx,$$

а

$$\varphi_s(n,\overline{A}_{ks}^{*}t)=\int\limits_{R^m}\exp\{i(\overline{A}_{ks}^{*}t,x)\}f_s(n,x)dx=$$

$$=\int\limits_{R^m}\exp\{i(t,\overline{A}_{ks}x)\}f_s(n,x)dx,$$

то після заміни змінних $v=\overline{A}_{ks}x$ одержимо, що

$$\varphi_s(n,\overline{A}_{ks}t)=\int\limits_{R^m}\exp\{i(t,\overline{A}_{ks}x)\}f_s(n,x)dx=$$

$$=\int\limits_{R^m}\exp\{i(t,v)\}f_s(n,\overline{A}_{ks}^{-1}v)\left|\det\overline{A}_{ks}\right|dv.$$

Враховуючи, що

$$\int\limits_{R^r}\varphi_s(n,\overline{A}_{ks}t)dF_n(u_1,...,u_r)=\int\limits_{R^m}\exp\{i(t,x)\}\int\limits_{R^r}f_s(n,\overline{A}_{ks}^{-1}x)\left|\det\overline{A}_{ks}\right|dF_n(u_1,...,u_r)dx,$$

то із рекурентного рівняння (5) одержимо необхідне співвідношення.

Наслідок. Нехай вектор X_n є розв'язком рівняння

$$X_{n+1}=X_n+A(\xi_{n+1},\xi_n)X_n,\quad X_0=\zeta_0,$$

та у випадкового вектора ζ_0 існує щільність розподілу, причому матриці A_{ks} невід'ємно визначені. Тоді існують частинні щільності розподілу, які можуть бути визначені із рекурентного рівняння

$$f_k(n+1,x)=\sum_{s=1}^{q}f_s(n,(E+A_{ks})^{-1}x)\det(E+A_{ks}).$$

Позначимо далі через $m_k(n)$ та $D_k(n)$ відповідно величини

$$m_k(n)=\int\limits_{R^m}xdF_k(n,x),$$

$$D_k(n)=\int\limits_{R^m}xx^{*}dF_k(n,x).$$

Твердження 1. Припустимо, що у рівнянні (3) для випадкових величин $\eta_{jn},j=\overline{1,r},\zeta_0$ існують моменти першого та другого порядків. Тоді у вектора X_n також існують моменти першого та другого порядків, де мають місце рівності

$$Ex(n)=\sum_{k=1}^{q}m_k(n),$$

$$Ex(n)x^{*}(n)=\sum_{k=1}^{q}D_k(n).$$

Доведення цього твердження легко одержати із тих міркувань, що рівняння є лінійним та його розв'язок має вигляд

$$X_n=\prod_{s=1}^{n-1}\left(A(\xi_{s+1},\xi_s)+\sum_{j=1}^{r}B_j(\xi_{s+1},\xi_s)\eta_{js}\right)\zeta_0,$$

а також із рівності

$$P\{X_n<x\}=\sum_{k=1}^{q}F_k(n,x).$$

Вектори $m_k(n)$ назвемо частинними середніми, а $D_k(n)$ – частинними дисперсійними матрицями.

Теорема 3. Нехай X_n є розв'язком рівняння (3) та $E\eta_{jn}=0$. Тоді частинні середні та частинні дисперсійні матриці задовольняють рекурентним рівнянням

$$m_k(n+1)=\sum_{s=1}^{q}A_{ks}m_s(n)\pi_{ks},\quad m_s(0)=E\zeta_0p_s,\qquad(6)$$

$$D_k(n+1)=\sum_{s=1}^{q}\pi_{ks}(A_{ks}D_s(n)A_{ks}^{*}+$$

$$+\sum_{ij}B_{i_{ks}}D_s(n)B_{j_{ks}}^{*}E\eta_{in}\eta_{jn},\quad D_k(0)=E\zeta_0\zeta_0^{*}p_s.\qquad(7)$$

Доведення.

Оскільки

$$\frac{d}{d\tau}\varphi_k(n,t+\tau v)\Big|_{t=0,\tau=0}=i(m_k(n),v),$$

$$\frac{\partial^2}{\partial\tau_1\partial\tau_2}\varphi_k(n,t+\tau_1v_1+\tau_2v_2)\Big|_{t=0,\tau_1=\tau_2=0}=-(D_k(n)v_1,v_2),$$

то із рекурентного рівняння (4) одержимо, що

$$\frac{d}{d\tau}\varphi_k(n+1,t+\tau v)=$$

$$=\sum_{s=1}^{q}\pi_{ks}\int\limits_{R^r}\frac{d}{d\tau}\varphi_k(n,\overline{A}_{ks}^{*}(t+\tau v)dF_n(u_1,...,u_r),$$

$$\frac{\partial^2}{\partial\tau_1\partial\tau_2}\varphi_k(n+1,t+\tau_1v_1+\tau_2v_2)=$$

$$=\sum_{s=1}^{q}\pi_{ks}\int\limits_{R^r}\frac{\partial^2}{\partial\tau_1\partial\tau_2}\varphi_k\left(n,\overline{A}_{ks}^{*}(t+\tau_1v_1+\tau_2v_2)\right)dF_n(u_1,...,u_r).$$

Зауважимо, що

$$\frac{d}{d\tau}\varphi_s(n,\overline{A}_{ks}^{*}(t+\tau v))\Big|_{\tau=0}=$$

$$=(\varphi_s'(n,\overline{A}_{ks}^{*}t),\overline{A}_{ks}^{*}v)=(\overline{A}_{ks}\varphi_s'(n,\overline{A}_{ks}^{*}t),v).$$

Із умови $\varphi_s'(n,0)=im_s(n)$ одержимо потрібну рівність для частинних середніх. Оскільки

$$\frac{\partial^2}{\partial\tau_1\partial\tau_2}\varphi_k(n,\overline{A}_{ks}^{*}(t+\tau_1v_1+\tau_2v_2))=$$

$$=(\varphi_s''(n,\overline{A}_{ks}^{*}(t+\tau_1v_1+\tau_2v_2))\overline{A}_{ks}^{*}v_1,\overline{A}_{ks}^{*}v_2)=$$

$$=(\overline{A}_{ks}\varphi_s''(n,\overline{A}_{ks}(t+\tau_1v_1+\tau_2v_2))A_{ks}^{*}v_1,v_2)$$

і $\varphi_s''(n,0)=-D_s(n)$, то враховуючи ці вирази одержимо рекурентне рівняння (7).

Зауваження. Аналогічним чином можна отримати рекурентні рівняння для неоднорідних лінійних рівнянь з марковськими коефіцієнтами.

В роботі було отримано рекурентні рівняння для часткових характеристичних функцій послідовності векторних випадкових величин, що є розв'язками лінійних різницевих рівнянь з марковськими коефіцієнтами та рекурентні рівняння для часткових моментів першого та другого порядку векторних величин, що задовольняють лінійним різницевим рівнянням загального вигляду з коефіцієнтами залежними від двох послідовних значень випадкових величин, що є ланцюгами Маркова з кінцевим числом станів.

Список використаних джерел

1. Коренівський Д.Г. Стійкість розв'язків систем різницевих рівнянь при стохастичних збуреннях їх коефіцієнтів. Алгебраїчні критерії / Коренівський Д.Г. –Київ: Ін-т математики НАН України, 2010. –210 с.
2. Королюк В.С. Стохастические модели систем / Королюк В.С. – Киев: Наукова думка, 1989. – 208 с.
3. Pandit S.C. On the stability of impulsiveby perturbed differential systems // Bull. Austral.Math.Soc., 1977, №3. –pp. 423–432.
4. Тихонов В.Н., Миронов М.А. Марковские процессы / В.Н. Тихонов, М.А. Миронов. –М.: Сов.радио, 1977. –488 с.
5. Валеев К.Г. Оптимизация линейных систем со случайными коэффициентами: Монография / К.Г. Валеев, О.Л. Корелова, В.И. Горелов // – М.: Изд-во РУДН, 1996. –256 с.

References

1. Korenivskiy, D. (2010). *Stability of solutions of systems of difference equations with stochastic perturbations of the coefficients. Algebraic criteria*. Kyiv: Institute of Mathematics of NAS of Ukraine.
2. Korolyuk, V. (1989). *Stochastic models of systems*. 1st ed. Kiev: Naukova dumka, p.208.
3. Pandit, S. (1977). On the stability of impulsiveby perturbed differential systems. *Bull. Austral. Math. Soc.*, №3, pp.423–432.
4. Tihonov, V. and Mironov, M. (1977). *Markov processes*. Moscow: Sovetskoe radio.
5. Valeev, K., Korelova, O. and Gorelov, V. (1996). *Optimization of linear systems with random coefficients: Monograph*. Moscow: RUDN.

Надійшла до редколегії 21.08.14

УДК 519.6

Яковенко О.А.[1], аспірант
Кудін В.І.[2], д.т.н., п.н.с.

Про інструментарії аналізу властивостей лінійних моделей у пакетах математичного програмування

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
[1]e-mail: sandra.yakov@gmail.com
[2]e-mail: vol.kudin@gmail.com

O. Iakovenko[1], graduate student
V. Kudin[2], doctor of science, senior researcher

About existing linear models properties analysis tools in mathematical software packages

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
[1]e-mail: sandra.yakov@gmail.com
[2]e-mail: vol.kudin@gmail.com

Досліджуються можливості проведення аналізу властивостей лінійних моделей у найбільш поширених пакетах математичного програмування. Наводиться перелік процедур аналізу обраних для порівняння пакетів. Окреслено напрями вдосконалення наявних інструментів аналізу. Обґрунтовується доцільність використання методу базисних матриць для проведення аналізу.

Ключові слова: оптимізація, аналіз чутливості, пакет прикладного програмування, симплекс метод, метод базисних матриць, збурення.

Solving optimization problem is an iterative process of repeated rectification. Except for finding optimal solutions this raises the question of how result characteristics can be influenced by changing parameters of a model.

Available linear models sensitivity analysis tools of the most common mathematical software programming packages are analyzed. Comparison of software packages operational functionality is represented. Inadequacy of existing techniques is highlighted. Point is also made of the lack of a common methodology or universal approach for analyzing system properties.

Suggesting the basis matrixes method for post-optimization analysis attention is focused on studying the effect of changing problem parameters on quantitative and qualitative characteristics of the result. For making an appropriate choice while applying the method the basis matrixes method is also giving an opportunity to take into account model specifics.

The method itself or its algorithm can be used for multiple post-optimisational purposes, such as: variables boundaries and optimal solution specification, optimum area localization and approximate solution finding.

Implementation of these procedures into instrumental arsenal of mathematical software systems as an appropriate automated functions may create an opportunity for complete and more detailed linear optimization model analysis.

Key Words: optimization, sensitivity analysis, mathematical software, simplex method, the basis matrixes method, perturbation.

Статтю представив д.т.н., проф. Волошин О.Ф.

Поява сучасних інструментальних "знарядь обчислень", неперервне вдосконалення ЕОМ (зростання швидкодії та обсягів пам'яті) призвело до суттєвого розширення можливостей проведення наукових досліджень в цілому і, зокрема, математичного моделювання процесів різної природи [1, с.7].

Відомо, що в процесі моделювання виникає ряд специфічних проблем [2-3] (неадекватності моделі та процесу, некоректності задачі тощо), зокрема, на стадії обчислень - отримання прийнятного числового результату за обмежений обсяг часу. В трудомістких математичних задачах це стало оцінюватися нарівні з доказами важких абстрактних тверджень і виведенням витончених формул [2, с.12].

При розв'язанні математичної задачі (за умови використання ЕОМ) оптимізаційний процес виглядає наступним чином:

1.Аналізується об 'єкт дослідження.

© Яковенко О.А., Кудін В.І., 2014

2.Будується математична модель.

3. Вибирається чисельний метод (дискретна модель і обчислювальний алгоритм).

4.Проводиться програмування для ЕОМ [1, с.11].

5.Проводиться обчислення та аналіз результатів. При потребі уточнюється структура моделі.

Побудова математичної моделі пов'язана зі спрощенням вихідного явища, недостатньо точним заданням коефіцієнтів рівняння та інших вхідних даних [там само, с.13], а тому процес дослідження вихідного об'єкту методом математичного моделювання та чисельного експерименту неминуче має наближений характер.

Найтиповішими похибками методу є похибки округлення та усікання і похибка дискретизації. Вхідні дані дискретної моделі, а саме коефіцієнти і праві частини, задаються в ЕОМ не точно, а з округленням. В процесі роботи алгоритму похибки накопичуються, у той час як сама величина похибки округлення залежить від двох чинників:

-точність подання дійсних чисел в ЕОМ;

-чутливість використовуваного алгоритму.

Алгоритм є стійким, якщо обчислювальні похибки зростають незначно [там само].

Зазначені вище малі кількісні зміни, багато з яких дослідник часом навіть не має змоги відстежити у процесі вирішення задачі, можуть призвести до великих якісних. Малі збурення можуть впливати на єдиність розв'язків моделі, статус її обмежень, структурні властивості розв'язків тощо.

Це обумовлює необхідність приділяти цьому аспекту належну увагу. Зміни у задачі (уточнення в моделі) повинні наближати до адекватності (бути "направленими"). Наявність аналізу змін в моделі в пакеті прикладних програм є важливим фактором при виборі інструментарію дослідження. Загально відомо, що серед задач математичного програмування клас лінійних оптимізаційних задач (насамперед, лінійного програмування) найбільш досконало розроблений та практично апробований для знаходження оптимальних розв'язків. Вони володіють і іншою унікальною властивістю - "здатністю" проведення аналізу компонент моделі, її власних властивостей, кінцевих розв'язків і структурних властивостей системи обмежень, є допоміжними при дослідженні нелінійних задач тощо [3-5].

Користуючись матричним записом, задачу лінійного програмування можна сформулювати у наступному вигляді:

Максимізувати $P = c^T x$ (1)

За умови $Ax = b$,

$(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \geq 0, i = 1, \dots, m)$, (2)

$x \geq 0$ $(x_j \geq 0, x_j = 1, \dots, n)$. (3)

P у рівнянні (1) зветься цільовою функцією, а співвідношення (2) та (3) – обмеженнями. A – матриця розміру n, де $n > m$ [3, с.25].

Відомо, що розв'язання задачі оптимізації (наприклад, симплекс-методом) являє собою ітераційний процес переходів за вершинами багатогранної множини, де кожен крок "знаходить" наступну вершину, що відповідає певними обмеженням. Тому під час розв'язання задачі оптимізації, наряду із знаходженням оптимальних розв'язків ставиться питання аналізу впливу змін параметрів задачі на кількісні та якісні характеристики рішення.

Базові методи аналізу та оптимізації задачі лінійного програмування зазнали активного розвитку та знайшли застосування завдяки фундаментальним дослідженням Л.В. Канторовича та практичним успіхам Г. Данцига в реалізації на ЕОМ симплекс-методу − методу оптимізаційного аналізу лінійної системи. Нижче перелічені лише деякі з методів, які розроблені на базі симплексних схем дослідження лінійних моделей:

- модифікований симплекс-метод [4, с.225];
- двоїстий симплекс-метод [там само, с.228];
- метод послідовного покращення плану [5, с.73];
- метод виключення невідомих (Гаусса) [6, с.39];
- метод повних виключень (Жордана-Гаусса); [5, с.47];
- метод штучного базису [там само, с.90];
- метод мінімальних нев'язок [6, с.173].

За умови заданої розмірності $(n \times m)$, кількість кроків k симплекс-методу залежить від конкретного завдання і теоретично їх не вдавалося оцінити зверху взагалі ніякою поліноміальною функцією розмірності

$k \leq const[\max(n, m)]^d$ (4)

з деяким фіксованим ступенем d. Існують теоретичні побудови задач для яких симплекс-метод "працює" погано. Однак, виявилося, що для реальних задач кількість кроків симплекс-

методу рідко більш ніж в кілька разів перевершує кількість невідомих і обмежень [7, с.4].

Тим не менш, необхідно наголосити, що говорячи про рішення задачі симплекс-методом вважається, що опорні плани є невирожденими. Виродженим опорним планом задачі лінійного програмування зветься такий план, в якому деяка змінна x_i дорівнює нулю, при чому i співпадає з номером одного з векторів даного опорного плану. Виродженість характеризується тим, що в розкладанні вектора P_0 за векторами деякого базису $P_1, P_2, \ldots . P_m$.

$$P_0 = x_1P_1 + x_2P_2 + \cdots + x_mP_m, \qquad (5)$$

де усі коефіцієнти $x_i \geq 0$ і принаймні один з них дорівнює нулю [5, с.141].

де усі коефіцієнти і принаймні один з них дорівнює нулю [5, с.141].

Для аналізу властивостей лінійних систем зазвичай застосовуються математичні прикладні комплекси [8, с.5]. Загальну кількість таких програмних комплексів встановити важко (напевне, понад багато десятків). На сьогоднішній день переважна більшість із них розроблені для ефективного знаходження оптимального рішення. Для деяких задач, особливо великої розмірності, нерідко виникає необхідність у пост-оптимізаційному аналізі.

Пост-оптимізаційний аналіз дозволяє проаналізувати, наскільки (яким чином) може вплинути зміна структурних елементів лінійної системи на оптимальне рішення.

Такий аналіз включає в себе дослідження впливу на саме рішення та його характеристики наступних факторів:

- зміни коефіцієнтів у цільовій функції;
- зміни у правих частинах обмежень;
- включення/виключення стовпців та рядків у матриці (обмежень);
- характеристики стійкості системи та інше.

З метою визначення можливостей існуючих пакетів програмного забезпечення у сфері аналізу чутливості лінійних моделей та виявлення функцій, що закладені у сучасні інструментарії дослідження, було проведено порівняльний аналіз найбільш використовуваних пакетів.

Як серед комерційних, так і серед тих, що перебувають у вільному доступі, для порівняння було відібрано наступні пакети: CPLEX Optimization, Lp_solve та MatLab (optimization toolbox).

Після аналізу існуючих у серійних пакетах інструментаріїв програмування було відібрано ключові функції, наявність яких може дати можливість провести аналіз впливу змін на властивості лінійних систем.

Для наочного порівняння пакетів прикладних програм, наведемо отримані дані у вигляді таблиці. У лівій колонці перелічені пакети прикладного програмування, в яких у більшій мірі ніж в інших представлена можливість аналізу чутливості до змін при розв'язанні задачі. У першій строчці таблиці перелічені структурні елементи системи, зміни у яких можна дослідити.

На перетині стовпців знаком «+» відзначено наявність відповідних аналізаторів у порівнюваних пакетах програмування.

Оператори, якими можна скористуватися у відповідних комплексах програмного забезпечення, перелічені нижче.

У пакеті прикладного програмування Lp_solve досить багато функцій, які дозволяють аналізувати вплив змін у цільовій функції (get_sensitivity_obj, get_ptr_sensitivity_obj, get_sensitivity_objex, get_ptr_sensitivity_objex) та у коефіцієнтах обмежень (get_sensitivity_rhs,

Таблиця 1

Наявність інструментарію для аналізу чутливості у сучасних ППП

		Зміни у цільовій функції	Зміни у правих частинах	Зміни у коефіцієнтах обмежень
1.	Lp_solve	+	-	+
2.	MOSEK for MatLab	+	-	+
3.	LINGO	+	+	-
4.	SAS/OR	-	+	-
5.	GAMS/Gurobi	+	-	+
6.	CPLEX Optimization	+	+	+

get_ptr_sensitivity_rhs, get_dual_solution, get_ptr_dual_solution, get_var_dualresult) [9]. Слід зазначити, що кількість змінних дещо обмежена і не може перевищувати 30 000, а кількість обмежень системи не може перевищувати 50 000. Тому, незважаючи на сфокусованість Lp_solve саме на вирішенні задач лінійного програмування та наявності інструментарію для пост-оптимізаційного аналізу вирішуваної задачі, він, скоріш за все, найкраще підходить для навчальної діяльності, де найчастіше постає необхідність вирішення нескладних завдань малої розмірності.

У рамках пакету MatLab, (у рамках дослідження наводиться як представник різноманітних інструментаріїв проведення науцкових досліджень як то MAPLE, MATHEMATIKA, SCILAB тощо) існує деякий сталий набір оптимізаційних інструментів. Наприклад, задля вирішення задачі лінійного програмування використовується функція linprog, що дозволяє вирішити задачу лінійного програмування добре відомим сімплекс-методом [10]. Проте, нажаль, можливість аналізу чутливості правої частини не представлена в цьому пакеті.

Оптимізатор LINGO може представляти звіти щодо інтервалів, у яких зміни у правих частинах та коефіцієнтах цільової функції ніяк не вплинуть на базис. Слід також зазначити, що користувачу може знадобитися ввімкнути таку функцію самостійно, адже вона збирає таку інформацію тільки за умови відповідного запиту користувача [11].

Пост-оптимальний аналіз у пакеті прикладного програмування SAS/OR представлений тільки можливістю аналізу змін у правих частинах досліджуваної моделі, за який відповідає процедура PROC LP [12].

Математичний програмний комплекс GAMS/Gurobi теж дозволяє досліджувати збурення у цільовій функції та коефіцієнтах обмежень [13].

Серед усіх існуючих, пакет програмного математичного забезпечення CPLEX Optimization toolbox володіє найбільш повним набором інструментів, він дозволяє провести аналіз чутливості і самої цільової функції (getObjSA) і обмежень (getBoundSA) і правих частин (getRHSSA) [14].

Першу версію CPLEX, CPLEX 1.0 було випущено у 1988 [15, с.4]. З точки зору пост оптимізаційного аналізу, CPLEX Optimization є найпотужнішим з усіх існуючих математичних пакетів. Тим не менш, і його інструментарію може бути недостатньо для проведення саме розширеного аналізу системи, наприклад, при релаксуванні чи звуженні обмежень.

Можна бачити, що у відомих сімплексних схемах у наявності різноманітний поелементний аналіз задачі. У той же час покомпонентний аналіз лінійної системи при збуренні рядків, стовпців, правих частин обмежень, вектора цільової функції можна було б іще удосконалити. Задачі, пов’язані із моделюванням об’єктів на основі інтервальних обчислень, можуть бути розв'язані за допомогою інтервального підходу. Основна ідея інтервальних обчислень полягає у представленні дійсного числа не одним машинним числом, а двома, які задають його гарантовані межі [16, с.14].

У методах інтервального аналізу враховують похибки у вхідних даних та похибки заокруглень на ЕОМ. У результаті усі дані набувають вигляду скінченних числових інтервалів. Разом з тим, описані в інтервальному аналізі методи не забезпечують все зростаючих потреб у математичному моделюванні складних статичних систем і вимагають систематизації [там само].

На сьогодні відсутня єдина методологія та підхід проведення аналізу властивостей систем. На часі стало виробити базову методологію аналізу широкого класу лінійних моделей та близьких до них [17, с.5].

Нажаль, багато математичних проблем все ще залишаються поза зоною уваги дослідників. Зокрема, проблеми існування, єдиності, неєдиності, необмеженості множини розв'язків оптимізаційної задачі. Можна сказати, що питання структурного аналізу властивостей лінійної системи, а також її еволюція при заміні елементів, їх функціональній залежності та компонентів моделі наразі залишаються відкритими та дають простір для подальших досліджень.

Базовою методологією аналізу цих задач (в класі лінійних та слабкозбурених моделей) може бути обрано обчислювальні методи, в основі яких закладена ідеологія методу базисних матриць та послідовного аналізу [17].

Схема методу базисних матриць може бути застосована для побудови наступних процедур аналізу моделі на стадії дооптимізації:

− уточнення меж змінних та оптимального розв'язку;

− локалізація області оптимума;

− знаходження наближеного розв'язку;

− побудова агрегуючих множин;

− ”виділення” фундаментальної системи обмежень;

− на основі релаксування замінювати дослідження на оптимальність початкової моделі великої розмірності послідовністю взаємозв’язаних підзадач меншої розмірності [18, с.97].

Розробка та впровадження перелічених вище процедур в інструментальний арсенал математичних комплексів у якості відповідних автоматизованих функцій не тільки спростить, але й може вивести на якісно новий рівень задачу до- та пост- оптимізаційного аналізу, а також створити можливість для більш повного та детального аналізу лінійних оптимізаційних моделей. Загальний огляд стану наукової проблеми дає підстави стверджувати, що на терені розв'язування задач аналізу та оптимізації класу лінійних моделей все ще залишається велика кількість невирішених та невисвітлених питань, що у свою чергу, свідчить про необхідність подальших наукових пошуків та розробки нових методів.

Список використаних джерел

1. *Самарский А.А.* Численные методы : учеб. пособие для вузов / А. А. Самарский, А. В. Гулин. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
2. *Гольштейн Е.Г.* Линейное программирование. Теория и конечные методы / Д. Б. Юдин, Е. Г Гольштейн. – М. : Государственное издательство физико-математической литературы, 1963. – 775 с.
3. *Муртаф Б.* Современное линейное программирование / Б. Муртаф : пер. с английского. – М. : Мир, 1984. – 224 с.
4. *Схрейвер А.* Теория линейного и целочисленного программирования / А. Схрейвер. – В 2-х т. Т. 1: Пер с англ. – М. : Мир, 1991. – 360 с.
5. *Гасс С.* Линейное программирование / С. Гасс : пер. с английского Е.Г. Гольштейна; под ред. Д.Б.Юдина. – М. : Физматгиз, 1961. – 303 с.
6. *Гаврилюк І.П.* Методи обчислень : Підручник : У 2 ч. / І.П. Гаврилюк, В.Л. Макаров. – К: Вища школа, 1995. – Ч. 1. –367 с.
7. *Хачиян Л.Г.* Сложность задач линейного программирования / Л. Г. Хачиян. – М. : Знание, 1987. – 32 с. – (Новое в жизни, науке, технике. Сер «Математика и кибернетика»; №10).
8. *Глазков Д.В.* Пакеты прикладных математических программ: метод. указания к проведению лабораторных работ / Д. В. Глазков. – Яросл. гос. ун-т им. П. Г. Демидова. – Ярославль: ЯрГУ, 2009. – 40 с.
9. *Lp_solve reference guide menu* (2013) [Electronic Resource]. – Mode of access : URL : http://lpsolve.sourceforge.net/5.5/get_sensitivity_obj.htm. – Title from the main screen.
10. *MOSEK optimization toolbox for MATLAB manual* (2014) [Electronic Resource]. – Mode of access : URL : http://docs.mosek.com/7.0/toolbox/Sensitivity_analysis.html. – Title from the screen.
11. National Institute of Technology Calicut. Department of Mechanical Engineering, Industrial Engineering Lab (2007) *Sensitivity Analysis of Linear Programming* (LP) [Online] .

References

1. SAMARSKIJ, A. and GULIN, A. (1989) *Numerical methods*. Moskow : Nauka.
2. GOL'SHTEJN, E. and JUDIN, E. (1963) *Linear programming. Theory and finite methods.* Moskow : Gosudarstvennoe izdatel'stvo fiziko-matematicheskoj literatury.
3. MURTAF, B. (1984) Modern linear programming. Moskow : Mir.
4. SCHRIJVER, A. (1986) *Theory of Linear and Integer Programming*. New York : Wiley.
5. GASS, S. (2010) *Linear Programming: Methods and Applications: Fifth Edition.* Dover books.
6. GAVRYLJUK, I. and MAKAROV, V. (1995) *Calculation methods*. Kyiv : Vyshha shkola.
7. HACHIJAN, L. (1987) *Complexity of linear programming problems*. Moskow : Znanie.
8. GLAZKOV, D. (2009) *Applied mathematical software packages*. Jarosl. gos. un-t im. P. G. Demidova. Jaroslavl': JarGU.
9. *Lp_solve reference guide menu* [Electronic Resource]. – Mode of access : URL : http://lpsolve.sourceforge.net/5.5/get_sensitivity_obj.htm. – Title from the main screen.
10. *MOSEK optimization toolbox for MATLAB manual* [Electronic Resource]. – Mode of access : URL : http://docs.mosek.com/7.0/toolbox/Sensitivity_analysis.html. – Title from the screen.
11. National Institute of Technology Calicut. Department of Mechanical Engineering, Industrial Engineering Lab (2007) *Sensitivity Analysis of Linear Programming* (LP) [Online] p. 22-25. – Available from: http://www.google.com.ua/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&frm=1&source=web&cd=1&ved=0CBwQFjAA&url=http%3A%2F%2Fwww.nitc.ac.in%2Fapp%2Fwebroot%2Fimg%2Fupload%2FSensitivity%2520Analysis.pdf&ei=T3IRVPiBPer8ygOw74I4&usg=AFQjCNEMpGTM9lNBzEq-AHSxfxnw0ZJBQg&sig2=3lE2BzV6YxmEAzFiKAcQKQ&cad=rjt.
12. *SAS/OR(R) 13.2 User's Guide: Mathematical Programming Legacy Procedures* (2014)

p. 22-25. – Available from: http://www.google.com.ua/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&frm=1&source=web&cd=1&ved=0CBwQFjAA&url=http%3A%2F%2Fwww.nitc.ac%2Fapp%2Fwebroot%2Fimg%2Fupload%2FSensitivity%2520Analysis.pdf&ei=T3IRVPiBPer8ygOw74I4&usg=AFQjCNEMpGTM9lNBzEq-AHSxfxnw0ZJBQg&sig2=3lE2BzV6YxmEAzFiKAcQKQ&cad=rjt.

12. *SAS/OR(R) 13.2 User's Guide: Mathematical Programming Legacy Procedures* (2014) [Electronic Resource]. – Mode of access : URL :http://support.sas.com/documentation/cdl/en/ormplpug/67519/HTML/default/viewer.htm#ormplpug_lp_details19.htm. – Title from the screen.
13. *GUROBI 5.6 Manual* (2014) p.204. [Electronic Resource]. – Mode of access : URL :http://www.google.com.ua/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&frm=1&source=web&cd=2&cad=rja&uact=8&ved=0CCYQFjAB&url=http%3A%2F%2Fwww.gams.com%2Fdd%2Fdocs%2Fsolvers%2Fgurobi.pdf&ei=GxASVMDlAebqyQPZpoKgBQ&usg=AFQjCNEnvcG3ZBb7O8AJJdIsVlzvv8Z25g&sig2=FKhkCP0sJnzZfD6dmwEW3A&bvm=bv.75097201,d.bGQ.
14. *IBM ILOG CPLEX Optimization Studio V12.2 documentation* (2013) [Electronic Resource]. – Mode of access : URL : http://pic.dhe.ibm.com/infocenter/cosinfoc/v12r2/index.jsp?topic=%2Filog.odms.ide.help%2Fhtml%2Frefdotnetopl%2Fhtml%2FM_ILOG_CPLEX_Cplex_GetObjSA.htm. – Title from the main screen.
15. *Bixby R.* Solving Real-World Linear Programs: A Decade and More of Progress / Robert E. Bixby // Operations Research. – Vol. 50. – No. 1. – January-February, 2002. – pp. 3-15 .
16. *Дивак М.П.* Задачі математичного моделювання статичних систем з інтервальними даними / М. П. Дивак. – Тернопіль: Видавництво ТНЕУ «Економічна думка», 2011. – 216 с.
17. *Кудін В.І.* Аналіз та оптимізація лінійних систем методом допустимих базисних матриць / Володимир Іванович Кудін: Електронне видання, – 2014. – 45с.
18. *Волошин О.Ф.* Послідовний аналіз варіантів: Технології та застосування : Монографія / О. Ф. Волошин, Г. М. Гнатієнко, В. І. Кудін ; під заг. ред. О. Ф. Волошина ; Київ : Стилос, 2013. – 304 с.

[Electronic Resource]. – Mode of access : URL : http://support.sas.com/documentation/cdl/en/ormplpug/67519/HTML/default/viewer.htm#ormplpug_lp_details19.htm. – Title from the screen.

13. *GUROBI 5.6 Manual* (2014) p.204. [Electronic Resource]. – Mode of access : URL :http://www.google.com.ua/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&frm=1&source=web&cd=2&cad=rja&uact=8&ved=0CCYQFjAB&url=http%3A%2F%2Fwww.gams.com%2Fdd%2Fdocs%2Fsolvers%2Fgurobi.pdf&ei=GxASVMDlAebqyQPZpoKgBQ&usg=AFQjCNEnvcG3ZBb7O8AJJdIsVlzvv8Z25g&sig2=FKhkCP0sJnzZfD6dmwEW3A&bvm=bv.75097201,d.bGQ.
14. *IBM ILOG CPLEX Optimization Studio V12.2 documentation* [Electronic Resource]. – Mode of access : URL : http://pic.dhe.ibm.com/infocenter/cosinfoc/v12r2/index.jsp?topic=%2Filog.odms.ide.help%2Fhtml%2Frefdotnetopl%2Fhtml%2FM_ILOG_CPLEX_Cplex_GetObjSA.htm. – Title from the main screen.
15. BIXBY, R. (2002) *Solving Real-World Linear Programs: A Decade and More of Progress* Operations Research. Vol. 50. No. 1. January-February. p. 3-15 .
16. DYVAK, M. (2011) *Problems of static systems mathematical modeling using interval data.* Ternopil': TNEU «Ekonomichna dumka».
17. KUDIN, V. (2014) *Using acceptable basis matrices method for linear systems analysis and optimization.* Electronik issue.
18. VOLOSHIN, O., GNATIENKO, G. and KUDIN V. (20*13) Sequential hypothesis testing: technologies and applications* : Monograph. Kyiv : Stilos.

Надійшла до редколегії 05.09.14

РАДІОФІЗИКА

УДК 537.311.33

Гандзюк В.І.[1], студ.,
Павлюк С.П.[1], к.ф.-м.н., с.н.с.
Оберемок О.С.[1], к.ф.н., м.н.с.

Вплив польового розігріву на інжекційні ефекти в кремнієвих n^+-n-n^+ структурах

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4г, e-mail: gandziuk2009@gmail.com

V. I. Handziuk[1], stud.,
S. P. Pavljuk[1], Ph.D.
O. S. Oberemok[1], Ph.D.

The influence of field heating on injection effects in silicon n^+-n-n^+ structures

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4g,
e-mail: gandziuk2009@gmail.com

В роботі розглянуто вплив польового розігріву на інжекційні ефекти в кремнієвих n^+-n-n^+ структурах. Показано, що за умов виникнення ТГД домену польовий розігрів носіїв заряду не є визначальним.

Ключові слова: інжекційні ефекти, польовий розігрів, вольт-амперна характеристика

The features of electron transport in semiconductor structures at non-uniform heating and presence of non-equilibrium electron-hole plasma are discussed. The influence of field heating on injection effects in silicon n^+-n-n^+ structures, which are the most common used diffusion resistors in IC is studied. It is indicated that charge carries are warm in electric field of thermal gradient-drift (THD) domain, which appears in a set of semiconductors described conditions. The dependence of gradient of relation of mobilities of charge carries on temperature and electric field is analyzed. It is shown that THD domain occurs in silicon at significantly higher temperature and electric field than in germanium. It is also demonstrated that field heating of charge carries is not determinant mechanism in conditions of THD domain appearance. Such influence is present, but it is much less significant than non-uniform thermal heating of the lattice.

Key Words: injection effects, field heating, cv-curve

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Скришевський В.А.

Дослідження інжекційних ефектів займає одне із центральних місць у фізиці напівпровідників. Це пояснюється тим, що інжекційні явища мають місце в багатьох напівпровідникових приладах, а виявлення нових інжекційних ефектів створює нові можливості для їх розробки.

Відомо, що в напівпровідниках з біполярною провідністю електричний струм утворюється електронами і дірками. Співвідношення між густиною електронного J_n та діркового J_p струмів можна характеризувати величиною:

$$\lambda = J_p / J\,, \qquad (1)$$

де $J = J_n + J_p$.

Нехтуючи дифузійною складовою струмів J_n та J_p, можна отримати вираз:

$$\lambda = p / \left(bn + p\right), \qquad (2)$$

де $b = \mu_n / \mu_p$, μ_n та μ_p - рухливості електронів та дірок відповідно, n та p - їх концентрації.

Якщо λ змінюється вздовж протікання струму, то в зразку з'являються нерівноважні заряди.

Добре відомі випадки, коли зміна λ утворена шляхом технологічної зміни концентрації електронів та дірок. Наприклад $p-n$ перехід, n^+-n перехід. Протікання струму крізь $p-n$ перехід призводить до біполярної інжекції або ексклюзії носіїв заряду, а через n^+-n перехід – до акумуляції або екстракції. З цих явищ найбільш відома інжекція.

Сильні інжекційні ефекти можуть виникати також через зміну b в результаті зміни рухливості носіїв заряду. Такі ефекти цікаві для досліджень з фізики напівпровідників та експериментальних досліджень.

Розглянемо рівняння руху електронно-діркової плазми в напівпровіднику:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -V\frac{dp}{dx} + \frac{np}{q\left(bn+p\right)^2} j\frac{db}{dx} - \frac{p-p_0}{\tau}\,, \qquad (3)$$

де $V = b\left(n_0 - p_0\right) / q\left(bn+p\right)^2$, t - час, q - заряд електрона, τ - час життя носіїв заряду.

© ВІ. Гандзюк, С.П. Павлюк, О.С. Оберемок, 2014

Перший член в правій частині формули (3) описує звичайний амбіполярний дрейф, V - його швидкість. Другий член рівняння описує дрейф, що виникає за рахунок наявності градієнтів рухливостей зарядів. Третій член описує генераційно-рекомбінаційні процеси.

За стандартних умов, коли градієнти рухливості носіїв заряду відсутні або малі, другий і третій члени формули (3) значно менші від першого члена, і ними звичайно нехтують. Рух електронно-діркової плазми визначається першим членом.

Зміни рухливості найбільш просто можуть бути реалізовані за рахунок неоднорідного термічного розігріву і за рахунок польового розігріву в електричному полі.

Ефекти, пов'язані із неоднорідним термічним розігрівом для германію, були докладно описані в роботах [3, 4], а для кремнію – в роботах [5, 6]. Дослідження проводились на великих зразках, розміром порядку декількох сантиметрів. Ефекти, які виникають на зразках з мікронними розмірами, виготовленими за технологією КСДІ (кремній з діелектричною ізоляцією), досліджувались в роботах [7, 8].

В них виявлена нелінійність вольт-амперної характеристики та поява високопольової області були пояснені виникненням неоднорідного термічного розігріву та формуванням термічного градієнтно-дрейфового (ТГД) домену. Розрахунки роботи [7] показали, що разом із значним неоднорідним термічним розігрівом і появою градієнту температури у зразку виникає сильне електричне поле, яке призводить до насичення дрейфової швидкості носіїв [2]. Відбувається польовий розігрів електронно-діркової плазми, який раніше не враховували.

Метою даної роботи є аналіз впливу польового розігріву на градієнт відношення рухливості носіїв заряду для різних напівпровідникових матеріалів.

Зміна b відбувається не тільки за рахунок розігріву гратки, а і за рахунок польового розігріву носіїв заряду. Розглянемо його вплив на процес утворення ТГД домену.

Для значної частини реалізованого діапазону значень E електрони та дірки є теплими [2]. У цьому випадку:

$$\mu_n = \mu_{n0}\left(1-\gamma_n E^2\right), \quad \mu_p = \mu_{p0}\left(1-\gamma_p E^2\right), \quad (4)$$

де γ_n та γ_p - коефіцієнти неомічності.

$$\gamma_n = C_n T^{\delta_n}, \quad \gamma_p = C_p T^{\delta_p} \quad (5)$$

$$\frac{1}{b}\frac{db}{dx} = \left[\left(\alpha-\beta\right)+AE^2\right]\frac{1}{T}\frac{dT}{dx} + 2\left(\gamma_p-\gamma_n\right)E\frac{dE}{dx}, \quad (6)$$

де $A = \gamma_p\delta_p - \gamma_n\delta_n$

Теоретичні розрахунки

Розрахунки будемо проводити для структури №2, довжиною 2.4 мкм, описаної в роботах [7, 8]. Експериментально розподіли температури та поля вздовж зразка в роботах [7, 8] поміряні не були через малі розміри структури але було вказане оціночне значення температури $T \approx 1350\,K$ та поля $E \approx 4\times10^4$ В/см. Залежність температури – неоднорідна і має максимум, оскільки існує тепловідбір із приконтактних ділянок. Подібно поводить себе і розподіл поля, так як для забезпечення омічного контакту приконтактні ділянки сильно легуються, і відповідно поле у них буде слабким. Було також встановлено [8], що при утворенні високопольової області із частини структури шириною приблизно 1.5 мкм виходило випромінювання. Тому для розрахунків вибрано залежності температури та поля, що відповідають розподілу Гауса із напівшириною піку 1.5 мкм та максимумами відповідно $1350\,K$ – для температури та 40000 В/см – для поля. Також відомо, що максимуми розподілів зміщені один відносно одного по осі x за рахунок того, що один із контактів є запірним, а інший – анти запірним. Нормовані графіки залежностей температури та поля від координати наведено на рис. 1.

Для знаходження коефіцієнтів пропорційності у виразах (5) скористаємося даними таблиці 1. Отримані результати відображено в таблиці 2.

Промоделюємо вираз (6) відповідно до обраних параметрів. Розрахований розподіл величини $\frac{1}{b}\frac{db}{dx}$ за координатою представлено на рис. 2, а залежності від T та E показано на рис.3. Залежність виразу від координати є досить складною, а залежність від температури та поля

за певних значень параметрів змінює знак.

Проаналізуємо поведінку різних складових виразу (6). Графік залежності AE^2 та $(\alpha-\beta)$

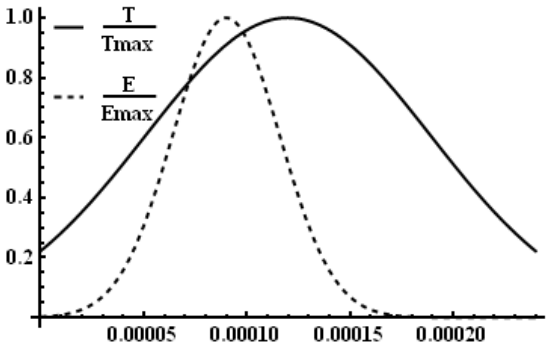


Рис.1 Розподіли температури та поля по структурі

Таблиця 1

Емпіричні параметри для розрахунків

Параметр	Кремній, Si	Германій, Ge
α	–2.6	–1.66
β	–2.3	–2.33
δ_n	–5.89	–4.27
δ_p	–3.25	–2.27
$\gamma_n,(T=300K)$	4.9×10^{-8}	3×10^{-7}
$\gamma_p,(T=300K)$	1.8×10^{-8}	2.1×10^{-7}

для кремнію наведено на рис.4, а для германію – на рис.7. Із отриманих залежностей видно, що за малих значень температури знак AE^2 в кремнії є протилежним від знаку $(\alpha-\beta)$ (рис.4).

Таблиця 2

Коефіцієнти пропорційності

Коефіцієнти	Кремній, Si	Германій, Ge
C_n	1.91×10^{7}	1.13×10^{4}
C_p	2.02	8.82×10^{-2}

Це перешкоджає утворенню домену. Але при досягненні певного значення температури ($T\approx550\,K$) вираз $A(T)$ змінює знак на протилежний (рис.6), таким чином сприяючи формуванню домену. В германії спостерігається інша картина: за невеликих температур знак AE^2 співпадає зі знаком $(\alpha-\beta)$ (рис.7) що стимулює утворення ТГД домену при невеликих температурах і її градієнтах.. Тобто в кремнії теж можна спостерігати утворення високопольової області як і у германії, але при більших полях та температурах, що і спостерігалось на експерименті.

На рис. 5 зображено залежність $\frac{1}{b}\frac{db}{dx}=f(T,E)$ при $x=1.25$ мкм (середина зразка). При досягненні певного значення x залежність змінює знак на протилежний. Але для будь-якого значення x залишається справедливим те, що при збільшенні температури вплив поля зменшується.

З отриманих даних видно, що за виникнення ТГД домену відповідає член з dT/dx в формулі (6). Раніше для спрощення другий доданок у цьому члені, який з'являється при врахуванні температурної залежності γ_n та γ_p не враховували. Розрахунки, проведені на основі даних [4], показують, що в германії при $T=300^\circ C$ $A=7\times10^{-7}$ см^2/В^2 та має знак як у $(\alpha-\beta)$ (рис.6). Тому вклад доданку AE^2 в тій частині зразка, де він суттєвий, тільки підсилює ефекти і не змінює якісної інтерпретації результатів. Інша картина спостерігається у кремнії. В ньому при $T=300K$ $A=2\times10^{-7}$ см^2/В^2 і знак його протилежний до знаку $(\alpha-\beta)$ (рис.6). Тому температурна залежність γ_n та γ_p послаблює описані ефекти. Але зі збільшенням температури величина A швидко зменшується ($\delta_n=-5.89$ $\delta_p=-3.25$) [1] і навіть змінює свій знак (рис.2). При достатньо сильному розігріві AE^2 стає менше $|\alpha-\beta|$ (рис.4) Домен в кремнії спостерігається за температур значно більших, ніж в германії. Це пов'язано із різними внесками члену з AE^2 у першому та другому випадках.

В зразку є ділянки, де член з dE/dx у виразі (6) перевищує член з dT/dx. Але розглянуті ефекти визначаються розігрівом ґратки, а якісного впливу на них польового розігріву не виявлено. Хоча в частині зразка член з dE/dx - великий, але в області максимуму напруженості поля, де формується домен, в силу умови $dE/dx\approx0$, він завжди малий.

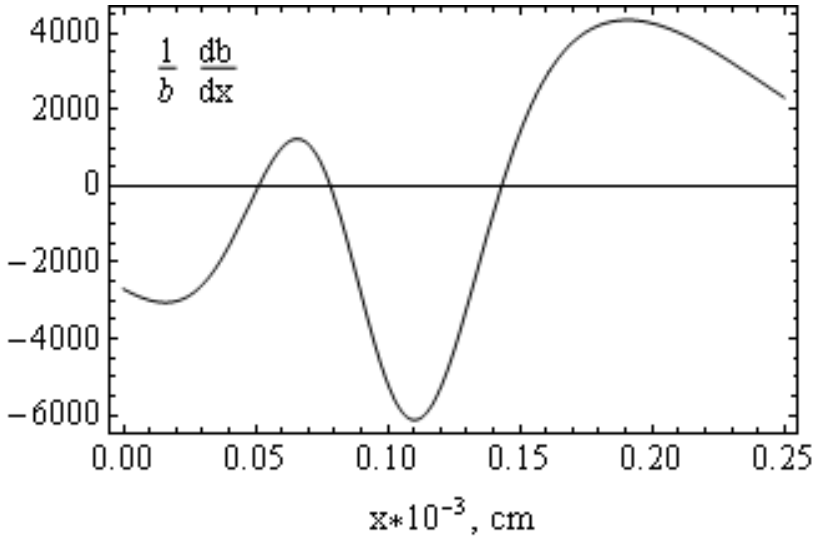


Рис. 2 Розрахований розподіл $\frac{1}{b}\frac{db}{dx}$, за координатою

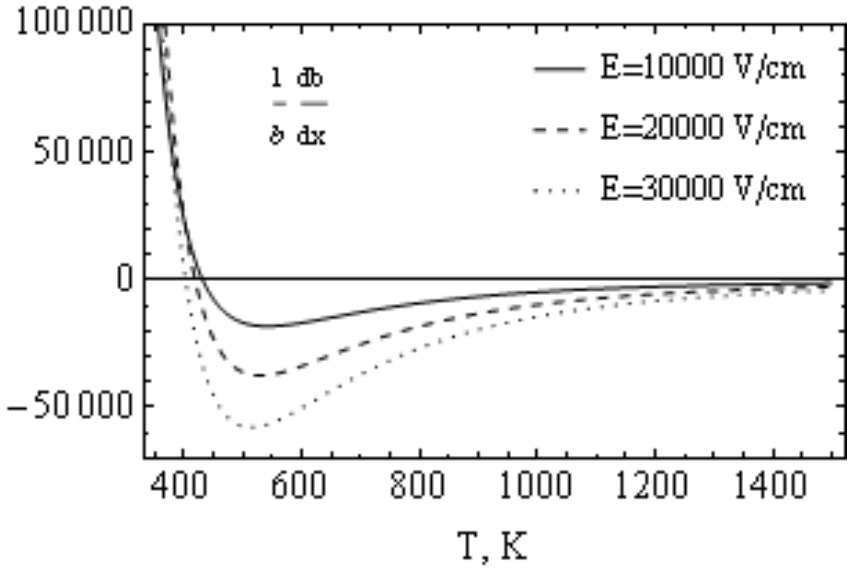


Рис.3 Розраховані залежності величини $\frac{1}{b}\frac{db}{dx}$ у центрі зразка від температури для декількох значень поля

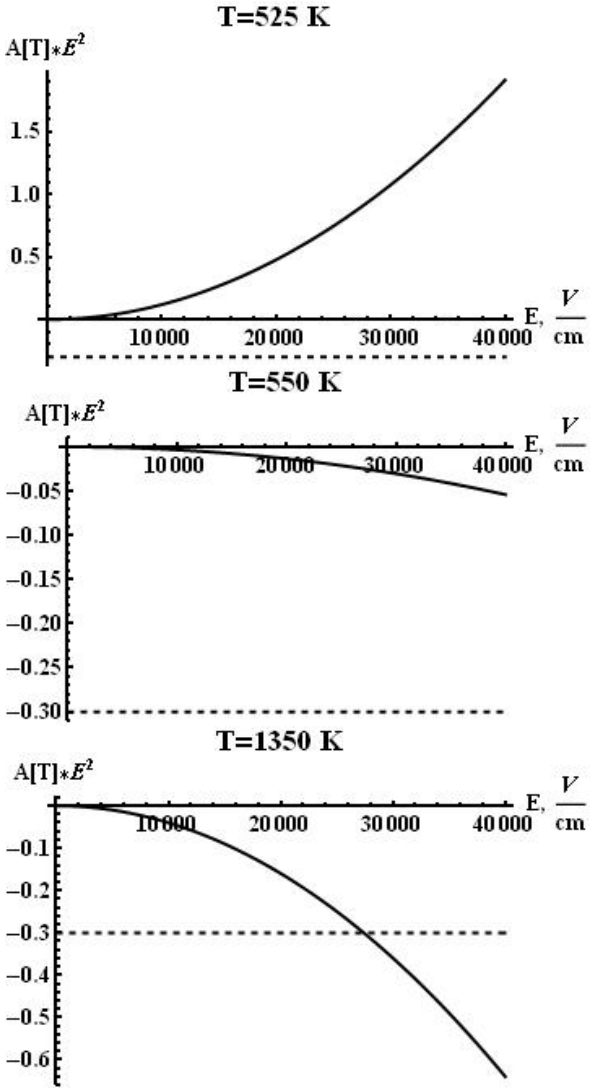


Рис.4 Залежність AE^2 та $(\alpha-\beta)$ для Si від прикладеного поля для різних температур

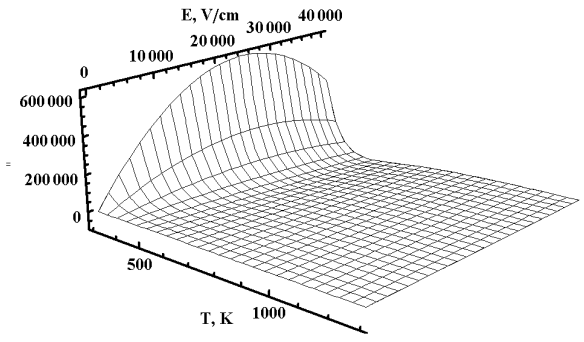


Рис. 5 Вигляд залежності $\frac{1}{b}\frac{db}{dx}=f(T,E)$, $x=1.25$ мкм

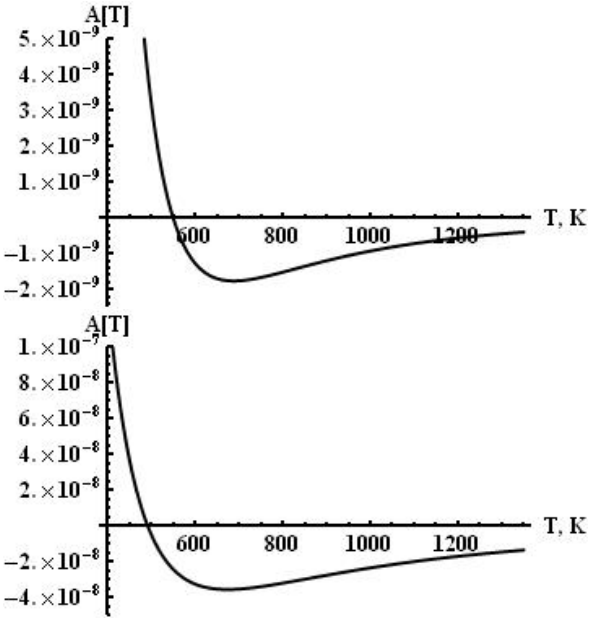


Рис.6 Залежність $A(T)$ для кремнію (зверху) та для германію (знизу)

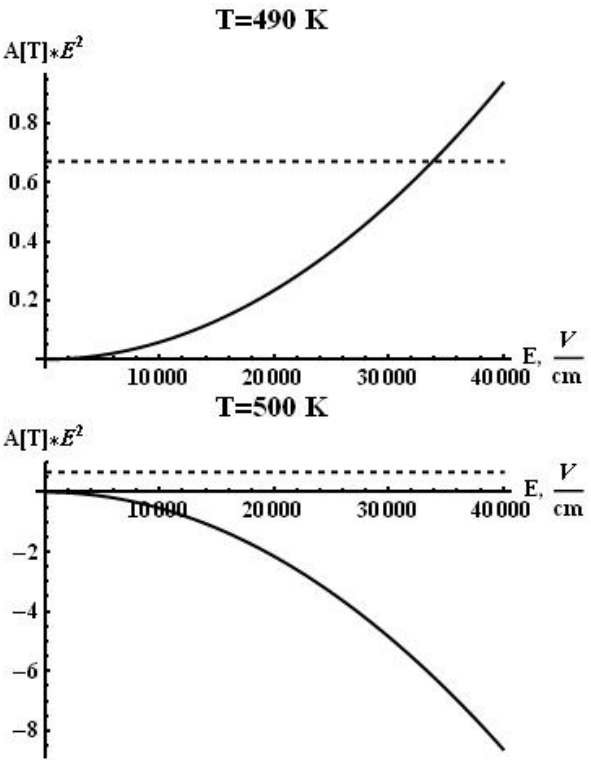


Рис.7 Залежність AE^2 та $(\alpha-\beta)$ для Ge від прикладеного поля для різних температур

Висновки

Вище сказане означає, що польовий розігрів не впливає на розподіл плазми по зразку. Такий вплив існує, але він менш суттєвий, ніж зміна концентрації за рахунок неоднорідного розігріву ґратки.

Список використаних джерел

1. *Зеегер К.* Физика полупроводников/ К. Зеегер. – Москва: Мир, 1977 – 616 с.
2. *Зи С.* Физика полупроводниковых приборов/ С. Зи (в 2-х книгах); ***пер. с англ. Гергеля В.А., Ракитина В.В.*** – Книга 1. - Москва: Мир. – 1981 – 456с.
3. *Добровольский В.Н.* Дрейф электронно-дырочной плазмы вызванный градиентами подвижностей носителей заряда / В.Н. Добровольский, С.П. Павлюк // Физика и техника полупроводников, **11** – 1977. – № 7. – с. 1377-1380.
4. *Добровольский В.Н.* Термический градиентно-дрейфовый домен в электронно-дырочной плазме германия / В.Н. Добровольский, С.П. Павлюк // Физика и техника полупроводников, **15** – 1981. – № 1. – с. 120-129.
5. *Добровольский В.Н.* Инжекционные эффекты в неоднородно разогретом кремнии / В.Н. Добровольский С.П. Павлюк, А.В. Романов // Физика и техника полупроводников, **15** – 1981. – № 2. – с. 411-414.
6. *Коноваленко Л.Д.* Полупроводниковые энерговиделяющие элементы / Л.Д. Коноваленко, Ф.В. Маркодей, // Фотоэлектроника, **12** – 2003. – с. 21-27.
7. *Павлюк С.П.* Исследования кремниевых диффузионных резисторов при протекании импульса тока большой мощности / С.П. Павлюк, В.В. Кушниренко, Г.К. Нинидзе, Л.Д. Коноваленко // Технология и конструирование в электронной аппаратуре, **5** – 2005. – № 59. – с. 23-26.
8. *Гандзюк В.І.* Інжекційні ефекти в кремнієвій симетричній n^+-n-n^+ структурі при живленні в режимі генератора напруги / В.І. Гандзюк, С.П. Павлюк, О.С. Оберемок // Вісник Київського університету – Сер. фіз.-мат. науки. – 2014. – № 1. – с. 221-224.

References

1. ZEEGER, K. (1977) *Physics of semiconductors*. Moscow: Mir.
2. SZE, S. (1981) *Physics of semiconductor devices.* (1st book) Moscow: Mir
3. DOBROVOLSKY, V. & PAVLIUK, S. (1977) Dreyf electronno-dyrochnoy plasmy vyzvannyy gradiyentami podvizhnostey nositeley zaryada *Fizika i Tehnika Polyprovodnikov*. 11 (7). p.1377-1380.
4. DOBROVOLSKY, V. & PAVLIUK, S (1981) Termicheskiy gradiyentno-dreyfovyy domen v elektronno-dyrochnoy plazme germaniya *Fizika i Tehnika Polyprovodnikov*. 15 (1). p.120-129.
5. DOBROVOLSKY, V., PAVLIUK, S. & ROMANOV, A. (1981) Inzhektsionnyye effekty v neodnorodno razogretom kremnii *Fizika i Tehnika Polyprovodnikov*. 15 (2). p.411-414.
6. KONOVALENKO, L. & MAKORDEY, F. et al. (2003) Poluprovodnikovyye energovidelyayushchiye elementy *Fotoelektronika*. 12. p.21-27.
7. PAVLIUK, S. & KUSHNIRENKO, V. et al. (2005) Issledovaniya kremniyevykh diffuzionnykh rezistorov pri protekanii impul'sa toka bol'shoy moshchnosti *Tekhnologiya i konstruirovaniye v elektronnoy apparature.* 5 (59). p.23-26.
8. GANDZIUK, V. & PAVLIUK, S. (2014) Inzhektsiyni efekty v kremniyeviy symetrychniy n^+-n-n^+ strukturi pry zhyvlenni v rezhymi heneratora napruhy *Bulletin of Taras Shevchenko* National University of Kyiv Series Physics & Mathematics. 1. p.221-224

Надійшла до редколегії 28.04.14

УДК 577.323

Глушенков А.М.[1], аспірант
Говорун Д.М.[1,2], д.б.н., проф.

Конформаційне різноманіття пар основ ДНК $m^9Gua{\cdot}m^1Thy$: квантово-механічне дослідження

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка,83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4г,
e-mail: s4rduk4r@gmail.com
[2] Інститут молекулярної біології і генетики НАН України,03680, м. Київ, вул.. Академіка Заболотного 150,
e-mail: dhovorun@imbg.org.ua

A. N. Glushenkov[1], post.grad.stud.,
D. N. Hovorun[2], Dr.Sci., Prof.

Conformational diversity of $m^9Gua{\cdot}m^1Thy$ DNA base pairs: quantum-mechanical study

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4g,
e-mail: s4rduk4r@gmail.com
[2] The Institute of Molecular Biology and Genetics of NASU, 03680, Kyiv, Zabolotnogo st., 150,
e-mail: dhovorun@imbg.org.ua

Вперше на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) встановлено, що повне конформаційне сімейство усіх можливих пар основ ДНК $m^9Gua{\cdot}m^1Thy$, асоційованих Н-зв'язками, налічує 29 структур, які займають діапазон відносних енергій Гіббса 0-36,32ккал/моль за нормальних умов. При цьому дві пари за участі мутагенних таутомерів основ, що мають вотсон-криківську геометрію, належать до числа енергетично найвигідніших (ΔG^0=0,07 і 0,30 ккал/моль), а класична воблівська пара має помітно вищу енергію (ΔG^0=2,30 ккал/моль).

Ключові слова: нуклеотидна основа, повне сімейство, гуанін-тимін, гуанін, тимін, водневий зв'язок.

For the first time on the MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) theory level in vacuo it has been shown that conformational family of all possible m9Gua·m1Thy nucleic base pairs which are associated by intermolecular H-bonds counts 29 structures and occupy relative Gibbs energies diapason of 0-36.32 kcal/mol in standard conditions. Global minimum corresponds to quasi degenerated energy level of base pairs 1 and 2 which are stabilized by 3 H-bonds and have relative Gibbs energies of 0,00 and 0,07 kcal/mol respectively. Classical Wobble base pair has much higher energy of 2,30 kcal/mol and reverse Wobble base pair has an energy of 1,35 kcal/mol. It's been shown that non-canonical $m^9Gua^*{\cdot}m^1Thy$ base pair exists in 4 forms — Watson-Crick, reverse Watson-Crick, Hoogsteen and reverse Hoogsteen. We show that classical mass-spectrometric experiment should be interpreted through accounting of both Wobble and reverse Wobble structures. Also we established linear dependence of CH..O/N H-bonds energy from electronic density $E^{CH..O/N}_{HB} = 211{,}840/168{,}389{\cdot}\rho - 0{,}138/0{,}107$ with rmsd values of 0,0287/0,0045 kcal/mol.

Keywords: nucleic base pair, complete family, guanine-thymine, guanine, thymine, hydrogen bond.

Статтю представив д.ф.-м.н. Анісімов І.О.

Вступ.

З'ясування елементарних фізичних засад помилок, які трапляються під час біосинтезу ДНК у клітині із частотою 10^{-7}-10^{-8}, - одна із актуальних тем сучасної молекулярної та квантової біофізики [1]. Попри чималі зусилля дослідників у цьому напрямку, донині залишається не з'ясованою до кінця будова неправильних пар канонічних основ ДНК, які ензиматично інкорпоруються у просторову структуру останньої. Ця робота покликана, з одного боку, пролити світло на природу неправильних пар гуанін·тимін (Gua·Thy), які розглядають у теорії точкових мутації як транзиції. Окрім того, така постановка задачі вельми корисна для інтерпретації класичних мас-спектрометричних експериментів із визначення енергії спарювання основ ДНК [2,3]. На відміну від традиційних підходів, коли аналізуються лише поодинокі неправильні пари [4], ми маємо на меті проаналізувати усі можливі їхні структурні реалізації, беручи до уваги усі

© А.М. Глушенков, Д.М. Говорун, 2014

можливі таутомерні форми обох основ. Саме такий спосіб досягнення мети видається нам не лише найпродуктивнішим, а й безальтернативним.

Об'єкти та методи дослідження.

Об'єктами дослідження слугували усі можливі неправильні пари $m^9Gua{\cdot}m^1Thy$ (m – метильна група, верхній індекс – її місцеположення), асоційовані міжмолекулярними водневими (Н) зв'язками. При цьому ми не обмежували себе ніякими фізико-хімічними засторогами щодо можливої будови пар, притримуючись лише новітніх поглядів на природу Н-зв'язування [5]. Ми також брали до уваги не лише основні, а й рідкісні таутомерні форми m^1Thy, та m^9Gua [6]. Вихідні структури генерувались за допомогою авторського алгоритму [7]. Дослідження проведено на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) у вакуумному наближенні. Усі зоптимізовані структури перевірено на стійкість за відсутністю уявних частот у їхніх коливальних спектрах, які отримували у гармонійному наближенні. Квантово-механічні розрахунки проведено із використанням програмного пакету Gaussian для Win32 (Gaussian 03, RevisionE.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, et. al.).

Енергію класичних міжмолекулярних Н-зв'язків визначали методом Йогансена [8], що ґрунтується на зсуві частот валентних коливань атомних груп — донорів Н-зв'язку, використовуючи при цьому вибіркове дейтерування для усунення механічних резонансів. Енергію CH...O/N Н-зв'язків та ван-дер-Ваальсових контактів розраховували методом Еспінози-Молінса-Лєкомте [9]. У роботі використано загальновживану нумерацію атомів основ.

Результати та їхнє обговорення.

Результати дослідження наведені в таблиці 1. Нами вперше встановлено, що конформаційне сімейство неправильних пар $m^9Gua{\cdot}m^1Thy$ складається із 29 Н-зв'язаних комплексів, які розміщуються у діапазоні відносних енергій Гіббса 0-36,32 ккал/моль за нормальних умов. При цьому 14 пар (1-8, 16-19, 27 і 29) є плоскосиметричними структурами, решта 15 комплексів мають неплощинну будову (табл. 1). Із усіх досліджених пар 9 стабілізуються двома і 20 - трьома міжмолекулярними Н-зв'язками (табл. 1). Окрім класичних Н-зв'язків OH..O, NH..N і NH..O нами зафіксовано також низку, так званих, незвичних (слабких), а саме — CH..O (19), CH..N (11). Для усіх CH..O/N Н-зв'язків NBO-аналіз показав наявність характерного перенесення заряду ($E^{(2)}$=0,1-5,12 ккал/моль). Цікаво, що екзоциклічні m-групи, надто у 1 і 9 положеннях глікозидного азоту, є доволі активними донорами Н-зв'язуваня. У переважній більшості випадків торсійна частота m-групи помітно зростає при її втягуванні у міжмолекулярний Н-зв'язок. Крім того, нами виявлено 2 ван-дер-Ваальсові контакти O2...O6 (17) і O4...O6 (18).

Вперше з'ясовано, що глобальний мінімум сімейства Н-зв'язаних гетероасоціатів $m^9Gua{\cdot}m^1Thy$ квазівироджений – це пари 1 і 2, кожна із них стабілізується трьома Н-зв'язками. Вільна енергія котрих різниться лише на 0,07 ккал/моль (рис. 1, табл. 1). Привертає до себе увагу те, що класична воблівська пара 7, до якої зазвичай апелюють у теорії спонтанного точкового як до транзиції мутагенезу, має відносну енергію Гіббса ΔG=2,30 ккал/моль. Цікаво також, що обернена воблівська пара 4 має дещо нижчу енергію (ΔG=1,35 ккал/моль), аніж щойнозгадана воблівська. З-поміж пар $m^9Gua^*{\cdot}m^1Thy$ і $m^9Gua{\cdot}m^1Thy^*$ (зірочкою позначено мутагенний таутомер) остання має міцніші Н-зв'язкі (рис. 1, табл. 1). Це пояснюється тим, що мутагенний таутомер m^1Thy має вищу комплексотвірну здатність, ніж аналогічний таутомер m^9Gua. Сумарна заселеність пар, зображених на рис. 1, така: 36,29%(1) + 32,46%(2) + 21,83%(3) + 3,71%(4) + 2,44%(5) + 2,30%(6) = 99,03%. Одержані результати однозначно вказують на те, що класичний мас-спектрометричний експеримент із визначення ентальпії взаємодії у воблівській парі $m^{9,6,6}Gua{\cdot}m^1Thy$ треба інтерпретувати, розглядаючи дві співіснуючі структури 4 і 7 (рис. 1, табл. 1), а не лише одну пару 4, як це робилося донині [4]. Наголосимо, що неправильна пара $m^9Gua^*{\cdot}m^1Thy$ має електронну будову, схожу на таку для канонічної пари $m^9Ade{\cdot}m^1Thy$, і як остання [10], існує у чотирьох конфігураціях – Вотсон-Криківська (2), обернена Вотсон-Криківська (1), Хугстинівська (6) і обернена Хугстинівська (5). Нарешті, нам вдалося зафіксувати лінійну залежність енергій неканонічних Н-зв'язків CH...O/N від величини електронної густини у критичній точці (рис. 2) $E^{CH..O}_{HB} = 211{,}840{\cdot}\rho - 0{,}138$ та $E^{CH..N}_{HB} = 168{,}389{\cdot}\rho - 0{,}107$ з середньоквадратичними відхиленнями 0,0287 ккал/моль та 0,0045 ккал/моль, відповідно.

Таблиця 1

Основні фізико-хімічні характеристики Н-зв'язаних гетероасоціатів $m^9Gua{\cdot}m^1Thy$

Комплекс	ΔG^0, ккал/моль	μ, D	Н-зв'язок/ вдВ контакт AH...B / A...B	ρ, а.о.	Δρ, а.о.	100ε	E_{HB}, ккал/моль	d_{AB}, Å	d_{HB}, Å	Δd_{AH}, Å	∠AHB, град
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)
1	0,00	4,94	N3H...N1	0,038	0,086	5,52	10,36	2,898	1,854	0,033	175,5
			O6H...O2	0,036	0,113	2,13	11,26	2,738	1,759	0,018	171,4
			N2H...O4	0,022	0,085	3,87	5,41	2,996	1,982	0,008	177,9
2	0,07	6,08	N1H...N3	0,038	0,095	5,14	10,98	2,864	1,835	0,023	172,2
			O4H...O6	0,059	0,128	1,52	22,09	2,586	1,569	0,052	173,0
			N2H...O2	0,023	0,087	4,04	5,69	2,976	1,960	0,011	174,3
3	0,30	6,42	O6H...O4	0,038	0,115	1,73	12,41	2,716	1,734	0,021	171,2
			N3H...N1	0,038	0,087	5,51	10,53	2,894	1,849	0,034	175,4
			N2H...O2	0,020	0,081	4,28	5,01	3,017	2,004	0,007	177,2
4	1,35	7,09	N3H...O6	0,031	0,106	2,92	8,91	2,860	1,826	0,025	173,6
			N1H...O4	0,036	0,119	2,69	10,93	2,809	1,779	0,019	177,0
5	1,60	4,30	N3H...N7	0,042	0,097	5,07	12,46	2,837	1,793	0,031	177,3
			C8H...O4	0,003	0,011	7,51	0,49	3,738	3,095	0,000	118,9
			O6H...O2	0,033	0,114	0,99	10,02	2,725	1,778	0,016	160,4
6	1,64	6,38	N3H...N7	0,042	0,096	5,05	12,63	2,834	1,790	0,032	177,6
			C8H...O2	0,002	0,011	9,66	0,47	3,745	3,110	0,000	118,3
			O6H...O4	0,035	0,117	0,45	11,01	2,705	1,755	0,019	160,6
7	2,30	8,76	N3H...O6	0,031	0,106	3,23	7,77	2,872	1,842	0,023	172,7
			N1H...O2	0,035	0,119	4,24	9,18	2,832	1,804	0,017	176,9
8	3,19	3,78	N1H...N3	0,042	0,097	4,96	12,41	2,833	1,801	0,026	172,4
			O2H...O6	0,071	0,127	1,35	27,68	2,535	1,502	0,070	173,2
			N2H...O4	0,024	0,089	3,56	6,17	2,958	1,938	0,015	174,8
9	4,48	4,75	C5H...O6	0,010	0,033	2,94	1,98	3,474	2,416	0,001	162,2
			N1H...O4	0,022	0,090	2,05	5,41	2,930	1,967	0,007	156,6
			N2H...O4	0,012	0,053	5,29	2,62	3,079	2,207	0,001	143,7
10	4,52	3,42	C1H...O6	0,013	0,040	1,83	2,32	3,355	2,309	0,000	160,1
			N1H...O2	0,025	0,096	4,32	5,91	2,911	1,931	0,007	160,4
			N2H...O2	0,010	0,041	5,95	2,09	3,162	2,310	0,001	141,3
11	4,56	2,88	C1H...O6	0,012	0,044	2,95	2,52	3,357	2,304	0,000	161,5
			N1H...O2	0,023	0,096	4,42	5,99	2,908	1,934	0,007	159,0
			N2H...O2	0,010	0,042	8,41	2,12	3,160	2,303	0,001	141,8
12	5,05	12,73	N3H...N3	0,022	0,068	6,85	4,62	3,094	2,068	0,019	172,2
			N2H...O4	0,029	0,105	2,72	8,05	2,876	1,860	0,013	172,1
			C9H...O2	0,013	0,046	1,75	2,63	3,333	2,280	-0,001	161,8
13	5,28	13,06	N3H...N3	0,021	0,067	6,81	4,52	3,100	2,075	0,019	172,2
			N2H...O2	0,027	0,103	3,02	7,48	2,894	1,879	0,012	172,1
			C9H...O4	0,013	0,048	1,76	2,73	3,320	2,263	-0,001	162,6
14	7,01	14,07	C6H...N7	0,009	0,026	3,91	1,34	3,600	2,553	0,001	162,1
			C5H...N7	0,004	0,010	53,11	0,55	4,044	3,076	-0,001	148,1
			C1H...O6	0,010	0,034	1,94	1,89	3,451	2,374	-0,004	170,0
15	7,12	14,18	C6H...N7	0,009	0,025	3,93	1,32	3,603	2,558	0,001	161,5
			C5H...N7	0,004	0,010	52,11	0,55	4,040	3,073	-0,001	148,0
			C1H...O6	0,010	0,034	2,03	1,90	3,447	2,371	-0,004	169,6
16	7,42	14,60	C6H...O6	0,012	0,042	2,15	2,23	3,341	2,289	0,000	162,9
			C1H...N7	0,008	0,023	4,13	1,22	3,662	2,615	-0,004	161,3
			C5H...O6	0,004	0,014	32,16	0,74	3,792	2,827	-0,001	147,4

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)
17	7,57	3,62	N3H...N7	0,024	0,075	6,12	5,32	3,024	2,018	0,001	164,0
			C8H...O4	0,014	0,056	0,63	2,99	3,090	2,231	0,001	134,9
			O2...O6	0,000	0,003	17,72	0,05	4,246	-	-	-
18	7,75	5,93	N3H...N7	0,023	0,074	6,07	5,05	3,037	2,034	0,000	163,5
			C8H...O2	0,014	0,054	0,78	2,86	3,100	2,251	0,001	134,0
			O4...O6	0,000	0,003	15,93	0,05	4,248	-	-	-
19	7,85	14,46	C6H...O6	0,010	0,031	1,35	1,73	3,456	2,427	0,000	157,9
			C1H...O6	0,009	0,034	10,03	1,75	3,447	2,388	-0,005	164,2
			C5H...N7	0,007	0,018	4,17	0,99	3,823	2,732	-0,001	179,1
20	8,74	11,15	C5H...N3	0,007	0,020	6,16	1,16	3,766	2,707	0,001	162,9
			N2H...O4	0,022	0,093	2,69	5,70	2,941	1,938	0,009	167,5
21	8,84	11,00	C5H...N3	0,007	0,020	7,63	1,20	3,748	2,690	0,001	162,9
			N2H...O6	0,021	0,091	3,27	5,46	2,942	1,946	0,009	167,5
22	9,18	12,97	N3H...N2	0,011	0,040	20,17	2,05	3,231	2,366	-0,014	142,2
			N2H...O2	0,019	0,078	6,22	4,52	2,964	2,049	0,010	148,1
23	9,24	11,84	N3H...N2	0,013	0,040	17,87	2,07	3,218	2,354	-0,014	142,0
			N2H...O4	0,022	0,077	3,17	4,74	2,952	2,028	0,012	149,3
24	9,34	8,52	C1H...N3	0,009	0,026	6,65	1,47	3,639	2,572	-0,001	165,7
			N2H...O2	0,022	0,094	3,11	5,69	2,943	1,934	0,009	170,7
25	9,43	5,86	C1H...N7	0,012	0,037	5,00	1,94	3,440	2,387	0,000	161,5
			C8H...O2	0,012	0,041	4,52	2,22	3,265	2,300	0,002	147,7
26	9,79	3,10	C8H...O4	0,013	0,047	5,01	2,47	3,272	2,243	0,002	158,2
			C5H...N7	0,009	0,026	6,01	1,40	3,600	2,536	0,001	163,8
27	13,38	8,28	N7H...N3	0,055	0,093	4,71	18,34	2,739	1,680	0,049	177,1
			C8H...O2	0,004	0,018	40,49	0,89	3,414	2,880	0,001	110,8
			O4H...O6	0,074	0,134	0,58	29,73	2,498	1,475	0,074	165,6
20	8,74	11,15	C5H...N3	0,007	0,020	6,16	1,16	3,456	2,427	0,000	157,9
			N2H...O4	0,022	0,093	2,69	5,70	3,447	2,388	-0,005	164,2
21	8,84	11,00	C5H...N3	0,007	0,020	7,63	1,20	3,823	2,732	-0,001	179,1
			N2H...O6	0,021	0,091	3,27	5,46	3,766	2,707	0,001	162,9
22	9,18	12,97	N3H...N2	0,011	0,040	20,17	2,05	2,941	1,938	0,009	167,5
			N2H...O2	0,019	0,078	6,22	4,52	3,748	2,690	0,001	162,9
23	9,24	11,84	N3H...N2	0,013	0,040	17,87	2,07	2,942	1,946	0,009	167,5
			N2H...O4	0,022	0,077	3,17	4,74	3,231	2,366	-0,014	142,2
24	9,34	8,52	C1H...N3	0,009	0,026	6,65	1,47	2,964	2,049	0,010	148,1
			N2H...O2	0,022	0,094	3,11	5,69	3,218	2,354	-0,014	142,0
25	9,43	5,86	C1H...N7	0,012	0,037	5,00	1,94	2,952	2,028	0,012	149,3
			C8H...O2	0,012	0,041	4,52	2,22	3,639	2,572	-0,001	165,7
26	9,79	3,10	C8H...O4	0,013	0,047	5,01	2,47	2,943	1,934	0,009	170,7
			C5H...N7	0,009	0,026	6,01	1,40	3,440	2,387	0,000	161,5
27	13,38	8,28	N7H...N3	0,055	0,093	4,71	18,34	2,739	1,680	0,049	177,1
			C8H...O2	0,004	0,018	40,49	0,89	3,414	2,880	0,001	110,8
			O4H...O6	0,074	0,134	0,58	29,73	2,498	1,475	0,074	165,6
28	18,01	10,31	N3H...N3	0,026	0,076	6,17	6,12	3,002	1,992	0,025	164,9
			O4H...N2	0,076	0,076	3,92	27,58	2,582	1,539	0,079	172,8
			C9H...O2	0,018	0,072	3,10	4,09	3,170	2,097	-0,002	167,2
29	36,32	5,28	N7H...N3	0,046	0,109	14,11	14,11	2,712	1,768	0,031	149,2
			O4H...C8	0,068	0,015	20,58	20,58	2,725	1,668	0,097	170,4
			O6H...O2	0,002	0,008	0,35	0,35	3,966	3,002	0,005	174,4

*Примітка. ΔG^0 - відносна енергія Гіббса (T=298,15K; P=1атм); μ — дипольний момент; AH...B/A...B — атоми, що беруть участь в утворенні H-зв'язку / ван-дер-ваальсового контакту (рис. 1); ρ — електронна густина; Δρ — лапласіан електронної густини; ε — еліптичність у критичних точках (3,-1); E_{HB} — енергія H-зв'язку; відстані d_{AB}, d_{HB} та кути ∠AHB між центрами H-зв'язку; подовження Δd_{AH} групи AH при утворенні H-зв'язку AH..B.

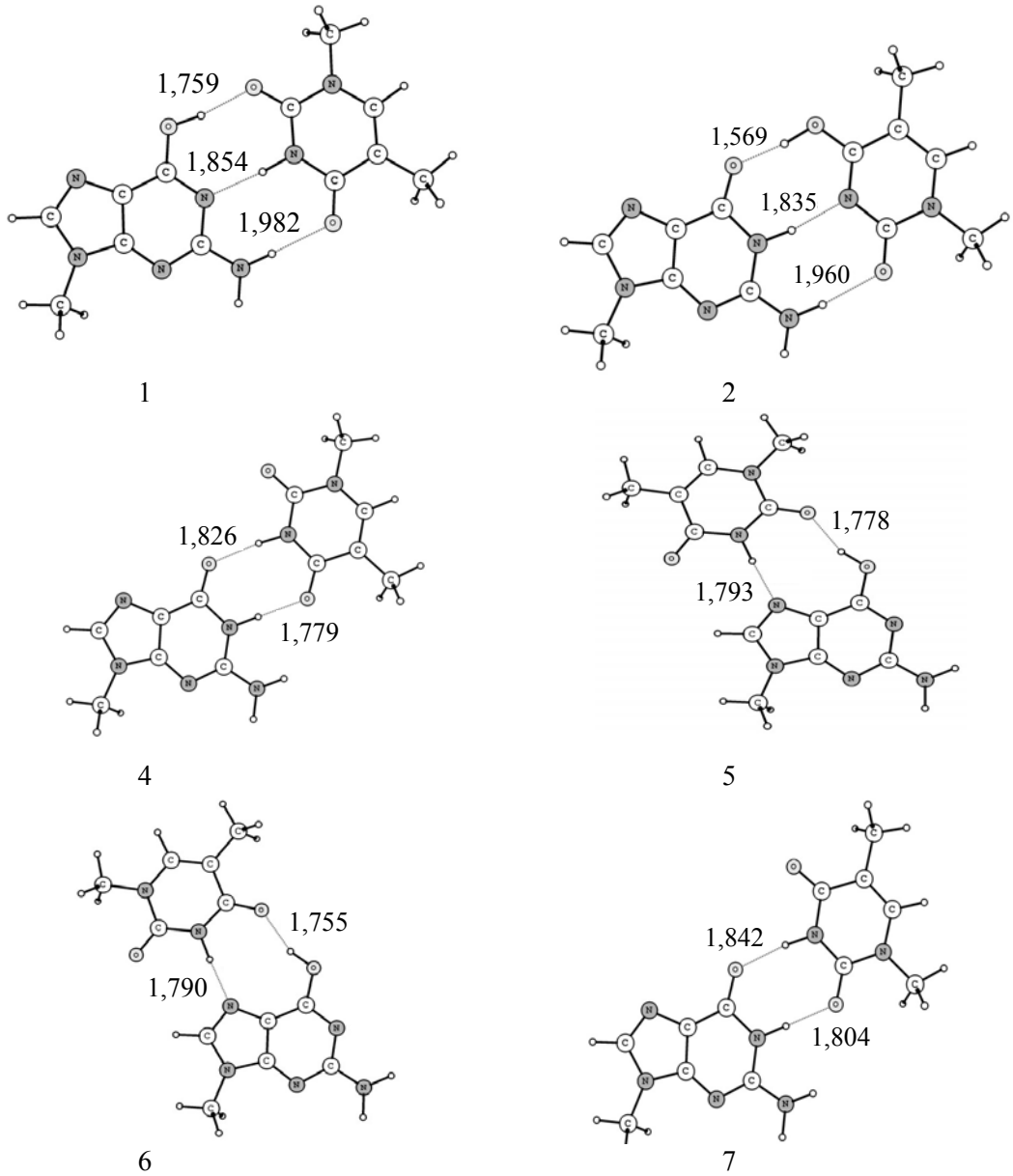


Рис. 1. Геометричні структури деяких енергетично найвигідніших Н-зв'язаних гетероасоціатів $m^9Gua{\cdot}m^1Thy$ (див. також табл. 1). Міжмолекулярні Н-зв'язки АН...В зображено пунктиром, їхні довжини Н...В вказані в Å

З'ясовано також, що у переважній більшості випадків відношення сумарної енергії міжмолекулярних Н-зв'язків до електронної енергії взаємодії основ у парах менша за 1; лише у тих випадках, коли всі міжмолекулярні Н-зв'язки слабкі (CH..O/N), це співвідношення наближається до 1.

Висновки.

Вперше встановлено, що конформаційне сімейство неправильних пар $m^9Gua{\cdot}m^1Thy$ складається із 29 Н-зв'язаних комплексів, які розміщуються у діапазоні відносних енергій Гіббса 0-36,32 ккал/моль за нормальних умов. Було показано, що мутагенна конформація $m^9Gua^*{\cdot}m^1Thy$ є найбільш енергетично вигідніша. Окрім класичних Н-зв'язків (OH..O; NH..N; NH..O) гетероасоціати також стабілізуються незвичними (слабкими) Н-зв'язками (CH..O і CH..N) та ван-дер-Ваальсовими контактами. Показано, що метильна група в гетероасоціатах є активним донором протону в утворенні Н-зв'язків. Було уточнено результат класичного мас-спектрометричного експерименту із визначення ентальпії взаємодії. Було отримано лінійну залежність між енергією слабких CH..O/N Н-зв'язків і електронною густиною у відповідній критичній точці.

Список використаних джерел

1. *Schaaper R.M.* Base selection, proofreading, and mismatch repair during DNA replication in Escherichia coli / R.M. Schaaper // J. Biol. Chem. - 1993. - **268**. - P. 23762–23765.
2. *Янсон И.К.* Ряд стабильности пар азотистых оснований нуклеиновых кислот. / И.К. Янсон, Л.Ф. Суходуб // Докл. АН СССР. - 1975. - №223. - С. 1010-1013.
3. *Суходуб Л.Ф.* Масс-спектрометрическое изучение взаимодействия азотистых оснований нуклеиновых кислот в вакууме. / Л.Ф. Суходуб, И.К. Янсон // Stud.biophys. - 1976. - №59. - С. 209-220.
4. *Lee J.C.* Diversity of base-pair conformations and their occurence in rRNA structural motifs. / J.C. Lee, R.R. Gutell // J.Mol.Biol. - 2004. - **344**. - P. 1225-1249.
5. *Steiner T.* The Hydrogen Bond in the Solid State / T. Steiner // Angew. Chem. Int. Ed.- 2002. - **41**. - P. 48-76.
6. *Глушенков А.Н.* Прототропная таутомерия 9-метилгуанина: квантово-механическое исследование. / А.Н. Глушенков, Д.Н. Говорун // Доповіді НАН України. – 2014. - №9. – С. 151-156.
7. *Глушенков А.Н.* Геометрическое построение всех возможных ассоциированных Н-связями пар нуклеотидных основ. / А.Н. Глушенков, Д.Н. Говорун. // Доповіді НАН України. – 2014. - №8 – С. 133-137.
8. *Iogansen A.V.* Direct proportionality of the hydrogen bonding energy and the intensification of the stretching (XH) vibration in infrared spectra / A.V. Iogansen // Spectrochimica Acta Part A.— 1999. — **55**. — P. 1585-1612.
9. *Espinosa E.* Hydrogen bond strengths revealed by topological analyses of experimentally observed electron densities / E. Espinosa, E. Molins, C. Lecomte // Chem.Phys.Letters. — 1998. — **285**. — P. 170–173.
10. *Kratochvıl M.* Global Minimum of the Ade-Thy Base Pair Corresponds Neither to Watson-Crick Nor to Hoogsteen Structures. Molecular Dynamic/Quenching/AMBER and abinitio beyond Hartree-Fock Studies / M. Kratochvıl, J. Sponer, P. Hobza // J. Am. Chem. Soc. - 2000. - **122** - P. 3495–3499.

References

1. SCHAAPER, R. (1993) Base selection, proofreading, and mismatch repair during DNA replication in Escherichia coli. *J. Biol. Chem.* 268. pp. 23762–23765.
2. YANSON, I., SUKHODUB, L. (1975) Rjad stabilnosti par azotistykh osnovanij nukleinovykh kislot. *Dokl. AN SSSR*. 223. pp. 1010-1013.
3. SUKHODUB, L., YANSON, I. (1976) Mass-spektrometricheskoe izluchenie vzaimodejstvija azotistykh osnovanij nukleinovykh kislot v vakuume. *Stud.biophys.* 59. pp. 209-220.
4. LEE, J., GUTELL, R. (2004) Diversity of base-pair conformations and their occurence in rRNA structural motifs. J.Mol.Biol. 344. pp. 1225-1249.
5. STEINER, T. (2002) The Hydrogen Bond in the Solid State. *Angew. Chem. Int. Ed.* 41. pp. 48-76.
6. GLUSHENKOV, A., HOVORUN, D. (2014) Prototropnaja tautomerija 9-metilguanina: kvantovo-mekhanicheskoe issledovanie. *Dopovidi NAN Ukrainy*. 9. pp. 151-156.
7. GLUSHENKOV, A., HOVORUN, D. (2014) Geometricheskoe postroenie vsekh vozmozhnykh assotsiirovannykh H-svjazjami par nukleotidnykh osnov. *Dopovidi NAN Ukrainy*. 8. pp. 133-137.
8. IOGANSEN, A. (1999) Direct proportionality of the hydrogen bonding energy and the intensification of the stretching (XH) vibration in infrared spectra. *Spectrochimica Acta Part A*. 55. pp. 1585-1612.
9. ESPINOSA, E., MOLINS E., LECOMTE C. (1998) Hydrogen bond strengths revealed by topological analyses of experimentally observed electron densities. *Chem.Phys.Letters.* 285. pp. 170-173.
10. KRATOCHVIL, M., SPONER, J., HOBZA, P. (2000) Global Minimum of the Ade-Thy Base Pair Corresponds Neither to Watson-Crick Nor to Hoogsteen Structures. Molecular Dynamic/Quenching/AMBER and abinitio beyond Hartree-Fock Studies. *J. Am. Chem. Soc.* 122. pp. 3495–3499.

Надійшла до редколегії 06.06.14

УДК 538.911

Горячко А. М.[1], к.ф.-м.н.

Наноструктуризація графену на поверхні 4H-SiC(0001)

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4г,
e-mail: andreandy2000@gmail.com

A. M. Goriachko[1], Ph.D,

Nanostructuring of graphene on the 4H-SiC(0001) substrate

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova ave., 4g,
e-mail: andreandy2000@gmail.com

Методом скануючої тунельної мікроскопії (СТМ) досліджено наноструктуризацію графенового шару, що утворюється внаслідок термічної декомпозиції карбіду кремнію у надвисокому вакуумі на поверхні 4H-SiC(0001).

Ключові слова: карбід кремнію, графен, СТМ, наноструктуризація.

Using the scanning tunneling microscopy (STM), the nanostructuring of the graphene layer was investigated on top of the 4H-SiC(0001) substrate. We demonstrate a preparation of the „nanomesh" on the 4H-SiC(0001) surface, by means of Si deposition and annealing in ultra-high vacuum. Such preparation procedure is necessary to remove any oxygen contamination and produce an initial Si-rich surface where the graphite is abscent. The nanomesh is formed by further annealing at 1200˚C without a Si flux, and is a hexagonal array of ~1 nm wide apertures placed with ~2 nm periodicity. It is very similar to the nanomesh reported by other authors for the 6H-SiC(0001) and 3C-SiC(111) polytypes of silicon carbide, implying that nanomesh is not sensitive to the ordering of SiC bilayers below the surface. Annealing the nanomesh in UHV without the Si flux produces graphite. Initially the graphite layer is corrugated with a nanomesh periodicity, but as it grows thicker a flat graphene-type surface is developed. A limited number of nanomesh regenerations was achieved by Si evaporation onto the graphitized surface and subsequent annealing without a Si flux

Key Words: silicon carbide, graphen, STM, nanostructuring.

Статтю представив д.ф.-м.н. Скришевський В.А.

Поверхня SiC(0001), незалежно від політипу кристалічної структури в об'ємі (3C, 4H, 6H), є перспективною з точки зору спонтанної наноструктуризації. На даній поверхні, нано-острівці графену виникають внаслідок сублімації кремнію при відпалі поверхні у надвисокому вакуумі при температурі ~1200ºC. Стадія, на якій поверхня стає наноструктурованою, є проміжною між стадіями насичення кремнієм та вуглецем. В останньому випадку поверхня є вкритою суцільним шаром графену або графіту.

В попередніх роботах [1-3] було показано, що типова процедура приготування наноструктурованої поверхні складається з видалення поверхневого шару зразка, хімічним способом, напорошення кремнію у надвисокому вакуумі на поверхню SiC(0001) при температурі від 800ºC до 950ºC, та наступного відпалу за відсутності напорошення Si при температурі від 1200ºC. При цьому, важливим є вибір оптимальної термічної дози на останньому етапі відпалу (етап графітизації), з метою утворення лише одного несуцільного моношару графену.

В попередніх роботах була описана однократна процедура приготування наноструктурованої поверхні SiC(0001). При перевищенні термічної дози на останньому етапі процедури наноструктурузизація поверхні втрачається, внаслідок формування суцільного шару графену або графіту. Нерозкритим залишалось питання, щодо незворотності процесу графітизації, зокрема, чи є можливим відновлення наноструктурованого графеногового шару після формування на поверхні графіту. Таким чином, основною метою даної роботи було експериментальне вивчення можливості повернення повністю графітизованої поверхні SiC(0001) до несуцільного графенового покриття

© А.М. Горячко, 2014

шляхом взаємодії із потоком атомів Si у надвисокому вакуумі при підвищеній температурі. Для з'ясування стану досліджуваної поверхні було обрано методику скануючої тунельної мікроскопії (СТМ), як такої, що має достатню роздільну здатність для адекватного спостереження найдрібніших поверхневих наноструктур.

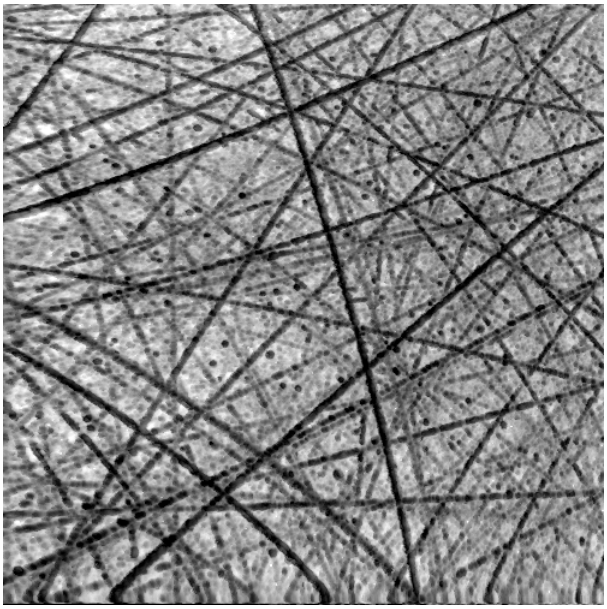


Рис. 1 СТМ зображення 10×10 μм^2 поверхні 4H-SiC(0001). Тунельна напруга на зразку U_T = 2.05 В, тунельний струм I_T = 0.18 нА.

В експериментах використовувалися зразки 4H-SiC(0001), поверхня яких зазнавала попереднього хімічно-механічного полірування. Після завантаження у надвисоковакуумну камеру із базовим тиском 1×10^{-10} мбар відбувалося повільне знегажування зразка шляхом поступового підвищення його температури до 600ºС. Після цього зразок відпалювався при температурі 1200ºС та після охолодження до кімнатної температури досліджувався за допомогою СТМ. На рис. 1 наведено СТМ зображення ділянки поверхні розміром 10×10 μm^2. Видно, що морфологія поверхні характеризується різнонаправленими лінійними подряпинами спричиненими механічним процесом полірування, а також заглибленнями круглої форми утвореними внаслідок хімічної реакції з реагентами полірувальної суміші.

На рис. 2а наведено зображення значно меншої ділянки тієї самої поверхні, що і на рис. 1. Видно, що поверхня є аморфною і вкритою невпорядкованими кластерами розмірами порядку 10 нм. Невпорядкованість відпаленої поверхні є результатом наявності окислу кремнію, що формується при тривалому зберіганні зразка в повітряному середовищі і якого неможливо позбутися за допомогою відпалу при вищезазначених температурах.

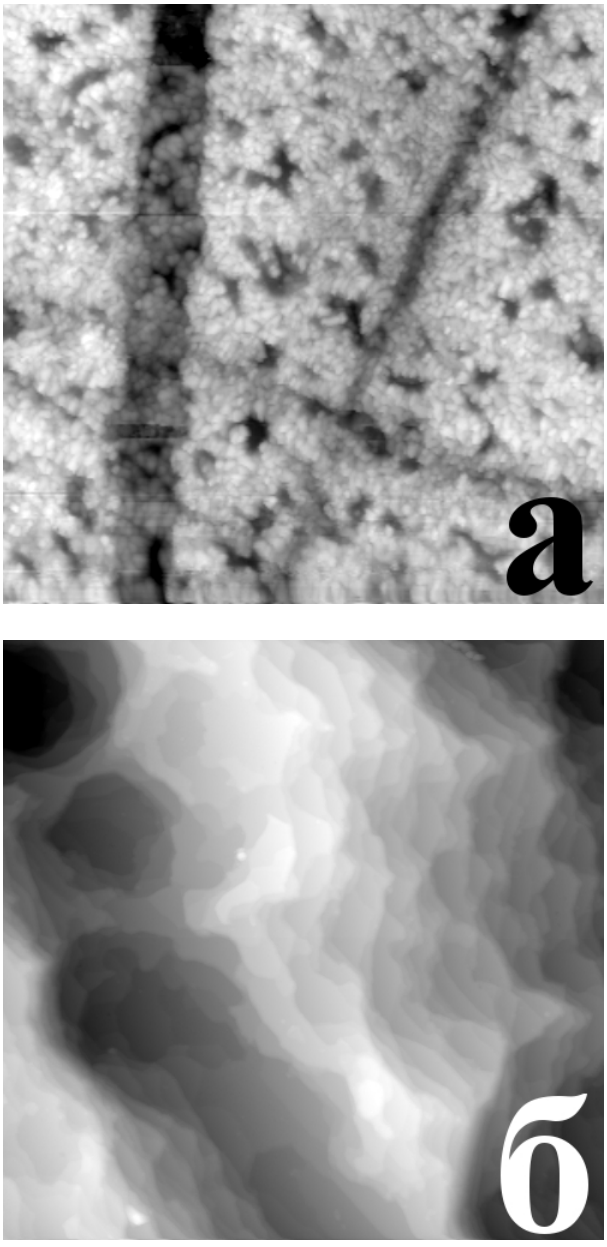


Рис. 2 СТМ зображення 320×320 нм^2 поверхні 4H-SiC(0001) в аморфному та кристалічному станах. а) Тунельна напруга на зразку U_T = 2.09 В, тунельний струм I_T = 0.15 нА. б) Тунельна напруга на зразку U_T = -1.54 В, тунельний струм I_T = 0.24 нА.

З метою позбутись кисневого забруднення, зразок було протравлено в розчині плавикової

кислоти HF безпосередньо перед завантаженням зразка в надвисоковакуумну камеру. Після цього, хімічно протравлений зразок був відпалений при температурі 1200ºС, ідентично до зразка зображеного на рис. 2а. В результаті була одержана морфологія поверхні, що характеризувалася атомарно гладкими терасами розділеними атомарними сходинками (рис. 2б).

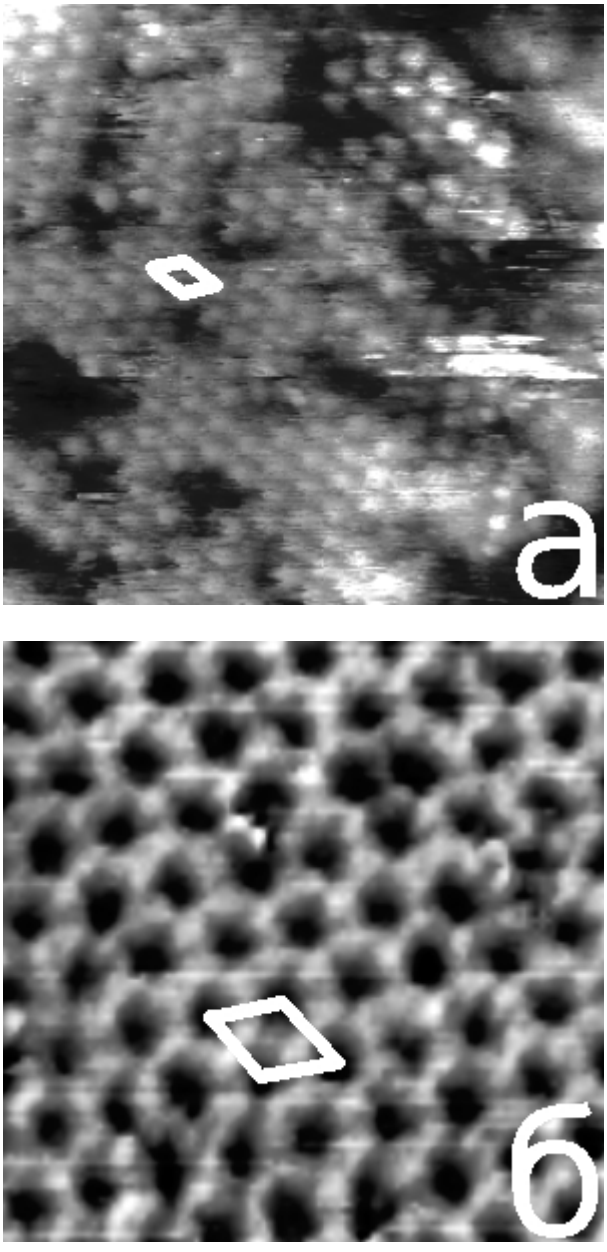


Рис. 3 СТМ зображення 16×16 нм^2 поверхні 4H-SiC(0001) в різних упорядкованих станах. а) Стан насичення атомами Si. Тунельна напруга на зразку U_T = 2.51 В, тунельний струм I_T = 0.28 нА. б) Покриття перфорованим графеном. Тунельна напруга на зразку U_T = 1.89 В, тунельний струм I_T = 0.35 нА.

При цьому, атомарна структура терас (яка не може бути розрізнена в масштабі рис. 2) залежала від детальних параметрів подальшого напорошення Si та термічної обробки, що детально продемонстровано на рис. 3-4.

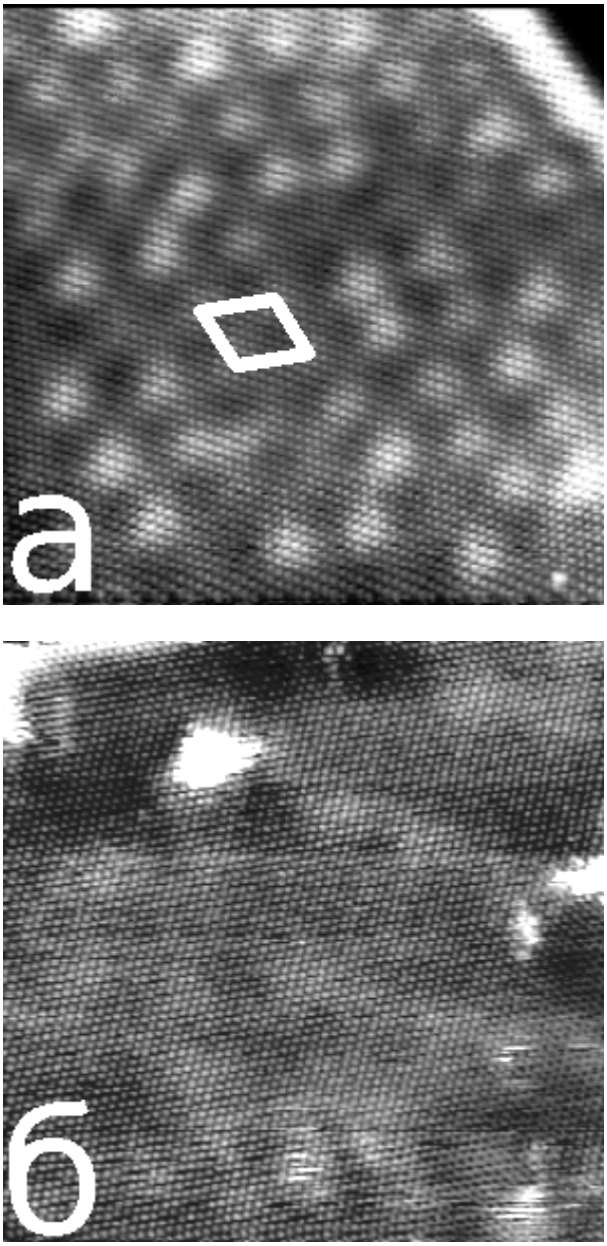


Рис. 4 СТМ зображення 16×16 нм^2 поверхні 4H-SiC(0001) із суцільним графеновим пориттям. а) Бішаровий графен. Тунельна напруга на зразку U_T = 0.07 В, тунельний струм I_T = 0.66 нА. б) Багатошаровий графен. Тунельна напруга на зразку U_T = 0.08 В, тунельний струм I_T = 1 нА.

На рис. 3а подано СТМ зображення із атомарною роздільною здатністю тієї ж поверхні, що і на рис. 2б, але після додаткового

напорошення атомів Si при температурі підкладинки 950ºС протягом 10 хв. В результаті такої процедури поверхня вкривалася шаром атомів Si, що формували надструктуру 3×3 (елементарну комірку окреслено білою жирною лінією). Подальший відпал такої поверхні при 1210ºС протягом 2 хвилин у надвисокому вакуумі за відсутності напорошення кремнію призводив до сублімації атомів Si та збагачення поверхні на вуглець у формі графену, причому його кількість була недостатньою для формування суцільного шару. Натомість, графенові фрагменти виявилися згрупованими у періодичну надструктуру 6×6 (елементарна комірка окреслена білим ромбом), що нагадує сітку з отворами діаметром 1 нм та періодичністю 2 нм (так звана наносітка).

Наступним етапом був відпал при температурі 1380ºС протягом 1 хв без напорошення Si, що спричинило утворення графенового покриття, яке виявилося суцільним проте періодично модульованим по висоті (рис. 4а). Окрім цього, на даному СТМ зображенні, прослідковується атомарна періодичність, що характерна для β-підгратки поверхні графіту С(0001). Атоми вуглецю, що належать цій підгратці складають лише половину поверхневих атомів, проте домінують на СТМ зображенні внаслідок переважаючої над іншою половиною (α-гратка) локальної густини електронних станів. Диференціація між α- та β- підгратками у поверхневому вуглецевому шарі досягається внаслідок геометричної специфіки взаєморозташування поверхневого та приповерхневого шарів, і вимагає їх фактичної наявності. Це дозволяє оцінити товщину графенового покриття на рис. 4а на рівні двох атомарних шарів (т. зв. бішаровий графен). Окрім цього, періодичність просторової модуляції по висоті, що є ідентичною до періодичності наносітки на рис. 3б (надкомірка окреслена білим ромбом) свідчить про адаптацію бішарового графену до топографії наносітки, яка знаходиться безпосередньо під ним.

Нарешті, завершальний цикл відпалу цього зразка (1380ºС, 6 хв, без напорошення Si) спричинив подальше збіднення на кремній та ріст багатошарового графену, СТМ зображення якого (рис. 4б) практично не відрізнялося від такого, що одержається на поверхні монокристалу графіту. Враховуючи наявність двох суцільних шарів графену, що виникли внаслідок відпалу (1380ºС, 1 хв, рис. 4а), можна в найпростішому наближенні оцінити додаткову кількість графену, що утворилась внаслідок відпалу (1380ºС, 6 хв), рівну 12 моноатомним шарам. Це призводить до оцінки загальної товщини графенового покриття рівної 13 графеновим шарам на зразку, що зображено на рис. 4б. Така товщина є достатньою для практично повного згасання модуляції по висоті, яка присутня рис. 4а в міру віддалення від інтерфейсу з SiC, і фактично для формування об'ємних властивостей графіту.

Таким чином, дана робота наочно демонструє поверхню 4H-SiC(0001) в двох різних наноструктурованих станах. Зокрема, прямі СТМ спостереження дозволили ідентифікувати моноатомний шар періодично перфорованого графену та бішаровий графен із періодичною модуляцією висоти.

Список використаних джерел

1. *Rutter G.M.* Imaging the interface of epitaxial graphene with silicon carbide via scanning tunneling microscopy / G.M. Rutter, N.P. Guisinger, J.N. Crain, et al // Physical Review B. - 2007. - **76**. - p. 235416(1)-235416(6).
2. *Rutter G.M.* Scattering and Interference in Epitaxial Graphene / G.M. Rutter, J.N. Crain, N.P. Guisinger, et al // Science. - 2007. - **317**. - p. 219-222(6).
3. *Riedl C.* Structural properties of the graphene-SiC(0001) interface as a key for the preparation of homogeneous large-terrace graphene surfaces / C. Riedl, U. Starke, J. Bernhardt, et al // Physical Review B. - 2007. - **76**. - p. 245406(1)-245406(8).

References

1. RUTTER, G.M. et al. (2007) Imaging the interface of epitaxial graphene with silicon carbide via scanning tunneling microscopy. *Physical Review B.* 76. p. 235416(1)-235416(6).
2. RUTTER, G.M. et al. (2007) Scattering and Interference in Epitaxial Graphene. *Science.* 317. p. 219-222.
3. RIEDL, C. et al. (2007) Structural properties of the graphene-SiC(0001) interface as a key for the preparation of homogeneous large-terrace graphene surfaces. *Physical Review B.* 76. p. 245406(1)-235416(8).

Надійшла до редколегії 03.09.14

УДК 535.373, 538.958

Карлаш А.Ю., к.ф.-м.н.

Еволюція кінетики фотолюмінесценції в композитних зразках $arSiO_x$/ nc-Si в процесі старіння

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4 д,
e-mail: anna_karlash@ukr.net

A.Yu.Karlash, Ph.D.

The evolution of PL relaxation processes under aging of $arSiO_x$/ nc-Si nanocomposites

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: anna_karlash@ukr.net

В роботі проведено дослідження кінетики фотолюмінесценції пресованих композитних зразків на основі нанокремнію в матриці аерогелю кремнезему nc-Si/arSiO$_x$. Проведено розрахунок харакерних часів згасання ФЛ та дисперсійного фоктору для свіжовиготовлених зразків та після зберігання в атмосферних умовах.Показано,що еволюція кінетики ФЛ в зразках nc-Si/arSiO$_x$ обумовлюєтьсяя формуванням інтерфейсних пасткових станів на межі нанокристаліт-оксидна матриця.

Ключові слова: нанокомпозити, релаксація, фотолюмінесценція

In this work the evolution of PL decay kinetic has been investigated using PL lifetime spectroscopy for nc-Si/arSiO$_x$ nanocomposites as prepared and after aging at ambient conditions. It was observed that for freshly prepared composites the PL kinetics was described by the single exponential low, whereas for aged samples PL kinetics transforms by adding the stretched exponential term to the single exponential low: $I(t)= A_1 exp(-t/\tau_1)^{\beta}+A_2 exp(-t/\tau_2)$.The characteristic PL lifetimes as well as dispersion factor β were calculated for nc-Si/arSiO$_x$ samples formed at different pressures (10.7, 13.3 and 16.6 MPa). It was observed that the prolongation of storage time results in increasing of the lifetime τ_1 and τ_2 and decreasing of dispersion factor β. The decreasing of dispersion factor as well as increasing of PL lifetimes during aging at ambient conditions is caused by the formation of interfacial nc-Si/arSiO$_x$ retrapping states that are responsible for radiative recombination processes, as a result, the integrated PL intensity essentially increases.

Key Words: nanocomposites, relaxation, photoluminescence.

Статтю представив д.ф.-м.н. Скришевський В.А.

Вступ

Ефективним методом стабілізації світловипромінюючих властивостей нанокремнію є створення композитних матеріалів nc-Si/SiO$_x$. [1,2]. В таких матеріалах кремнієві наночастинки є інкорпорованими в діелектричне оточення, яке перешкоджає процесам деградації їх люмінесцентних властивостей, сприяючи пасивації поверхні кристаліту та виключаючи з рекомбінаційного процесу канали безвипромінювальної рекомбінації, такі як обірвані зв'язки та дефектні центри. При цьому суттєво зростає квантовий вихід ФЛ. Так, в роботі [2] для пресованих композитних зразків на основі нанокремнію в матриці аерогелю кремнезему (nc-Si/arSiO$_x$) нами було отримане зростання інтегральної інтенсивності ФЛ більше, ніж на порядок, після витримки зразків в атмосферних умовах протягом тривалого часу.

Така поведінка зразків обумовлена, в основному, пригніченням центрів безвипромінювальної рекомбінації внаслідок формування інтерфейсних nc-Si/SiO$_x$ станів на межі нанокристаліт-оксидна матриця.

Створення поруватих композитів на основі нанокремнію в кремній-оксидній матриці дозволяє отримати люмінесцентний матеріал з високим ступенем поруватості та великою питомою площею поверхні, що відкриває широкі можливості практичного застосування, наприклад, в якості трансдьюсерів при створенні хімічних сенсорів з оптичною або електричною адресацією [3]. В даній роботі представлено результати експериментальних досліджень кінетики ФЛ для пресованих композитних матеріалів nc-Si/arSiO$_x$. Проаналізовано еволюцію релаксаційних процесів під час витримки зразків в атмосферних умовах, запропоновано можливі механізми, що

© А.Ю. Карлаш, 2014

Таблиця 1

Динаміка згасання ФЛ нанокомпозиту nc-Si/arSiO_x в процесі окиснення.

Час після збудження ФЛ t, μs	Пік 1 λ, nm/Δλ, nm			Пік 2 λ, nm/Δλ, nm		
	свіжий	окиснений 1 міс	окиснений 2 міс	свіжий	окиснений 1 міс	окиснений 2 міс
30	599 / 77	583 / 63	603 / 91	666 / 61	621 / 106	677 / 61
75	596 / 71	585 / 74	603 / 89	660 / 71	640 / 95	679 / 68
100	595 / 69	585 / 74	603/ 88	659 /71	642 / 93	679 / 70
150	597 / 71	598 / 80	603 / 88	657 / 77	667 / 76	679 / 72

пояснюють зміни в рекомбінаційних процесах під час окиснення зразків.

Матеріали і методи

В роботі досліджувались пресовані композитні зразки на основі прошкоподібного аерогелю кремнезему (ar-SiO_x) та нанокристалічного кремнію (nc-Si). Спосіб виготовлення зразків детально описано в роботах [1-3].

Для дослідження фотолюмінесценції (ФЛ) було використано техніку аналогової реєстрації кінетики ФЛ при кімнатній температурі в діапазоні довжин хвиль 350 – 750 нм [1,2,4]. Збудження ФЛ здійснювалось за допомогою азотного лазера (λ=337 нм, f=100 Гц, τ=8 нс, p=20 мВт). Для реєстрації емісійних спектрів використано монохроматор MS2004 SOLAR TII, фотопомножувач HAMAMATSU C6270 та аналогово-цифровий перетворювач (робочий режим до 1 ГГц). Для відновлення сигналу затухання ФЛ проводилась деконволюція сигналу на виході з підсилювача. Для успішного здійснення операції деконволюції в схемі використано підсилювач з широкою смугою пропускання та АЦП з частотою вибірки 1МГц і вище.

Проведено дослідження кінетики ФЛ для зразків nc-Si/arSiO_x свіжовиготовлених та після зберігання в атмосферних умовах протягом визначеного часу.

Результати та їх обговорення.

Аналіз кінетики ФЛ дозволяє робити більш точні висновки як щодо процесів утворення дефектних станів в забороненій зоні внаслідок окиснення досліджуваного матеріалу, так і щодо динаміки випромінювальних та безвипромінювальних переходів у досліджуваних матеріалах. Характерна кінетика ФЛ приведена на рис. 1 для свіжо виготовленого та витриманого в атмосферних умовах протягом 2 місяців нанокомпозиту nc-Si/arSiO_x.

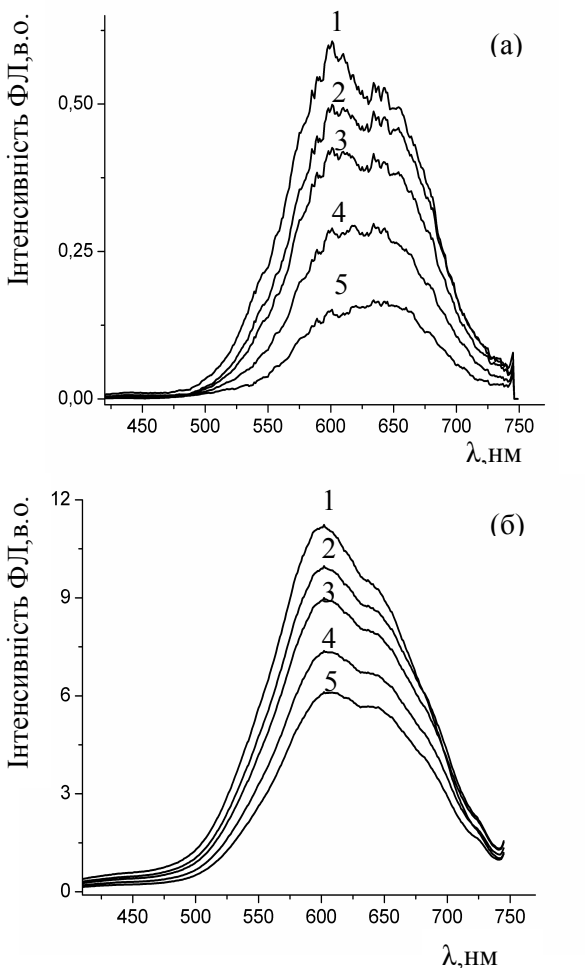


Рис. 1 Кінетика ФЛ композиту nc-Si/arSiO_x, пресованого під тиском 6 т, щойно виготовленого **(а)** та окисненого в атмосферних умовах протягом 60 діб **(б)**; сигнал ФЛ записано через: **1** – 30 μs, **2** - 75 μs, **3** – 100 μs, **4** – 150 μs, **5** – 200 μs після збудження лазерним імпульсом.

Для свіжо виготовленого зразка кінетика затухання ФЛ характеризується асиметрією з перерозподілом відносної інтенсивності основних максимумів (рис. 1,а), тоді як після тривалої витримки в атмосферних умовах зразок демонструє симетричне затухання в усьому діапазоні довжин хвиль (рис. 1,б). Для аналізу

Таблиця 2

Розраховані значення часу згасання ФЛ та дисперсійного фактору β для композитів nc-Si/SiO_x свіжо виготовлених та витриманих при атмосферних умовах

Формуючий тиск:	Час згасання ФЛ, τ_1/τ_2 μs			Дисперсійний фактор β		
	свіжий	окиснений 1 міс	окиснений 2 міс	свіжий	окиснений 1 міс	окиснений 2 міс
10.7 МПа	-/ 100	209 / 223	268 / 312	1	0,92	0,82
13.3 МПа	-/ 117	158 / 173	287 / 327	1	0,92	0,78
16.6 МПа	- / 106	175 / 182	356 / 302	1	0,9	0,8

кінетики ФЛ було проведено розклад спектрів на гаусові компоненти та проаналізовано еволюцію положення максимумів ФЛ та їх півширини в для різних зразків. У таблиці 1 приведено розраховані значення положення та напівширини гаусових компонент спектрів ФЛ, в залежності від часу окиснення зразків.

Аналізуючи отримані дані, можна зробити висновок, що у випадку свіжих зразків кінетика затухання ФЛ характеризується асиметрією зі зсувом положення обох максимумів в область менших довжин хвиль, при цьому відбувається перерозподіл відносного вкладу піків на користь довгохвильової компоненти спектра. Отже, для свіжих зразків час життя ФЛ збільшується при збільшенні довжини хвилі. Натомість для витриманих протягом 2 міс в атмосферних умовах зразків темп затухання ФЛ стає однаковим в усьому діапазоні довжин хвиль.

Таким чином, в процесі окиснення відбуваються суттєві зміни у кінетиці релаксаційних процесів досліджуваних матеріалів. На рис. 2 приведено криві згасання ФЛ, записані на довжині хвилі 660 нм (1.88 еВ) для зразка nc-Si/$arSiO_x$ свіжо виготовленого та після витримки в атмосферних умовах протягом 30 та 60 діб. Для спрощення порівняння даних криві пронормовано на максимальне значення.

Кінетика згасання для свіжовиготовлених зразків (рис. 2, крива 1) підпорядковується закону простої експоненти з характерним часом згасання τ. В процесі окиснення зразків кінетика ФЛ суттєво змінюється: для окиснених зразків залежність I(t) описується сумою двох доданків, перший з яких являє собою просту експоненту, а другий – так звану «затягнуту» експоненту: $I(t)= A_1 exp(-t/\tau_1)^{\beta}+A_2 exp(-t/\tau_2)$, де β – дисперсійний фактор [4], τ_1 та τ_2 – характерні часи згасання ФЛ.

В таблиці 2 наведено розраховані значення часів згасання та дисперсійного фактору для досліджуваних зразків nc-Si/$arSiO_x$, сформованих при різних тисках (10.7, 13.3 та 16 МПа). Дані отримані на основі кривих згасання ФЛ,

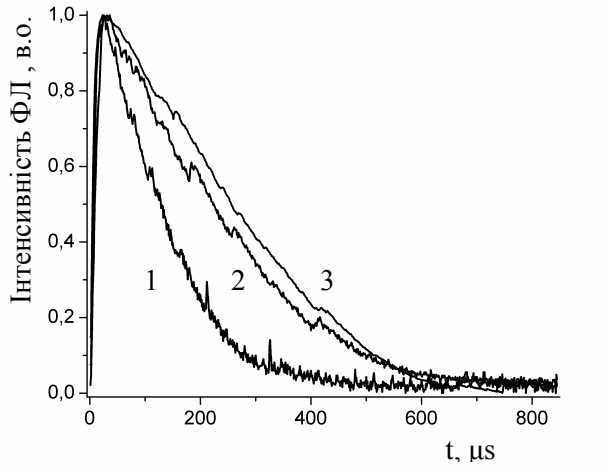


Рис. 2 Нормовані криві згасання ФЛ, записані на довжині хвилі 660 нм для зразка nc-Si/$arSiO_x$, спресованого під тиском 13,3 МПа: **1** - свіжо виготовлений зразок та після зберігання протягом **2** – 30 діб та **3** – 60 діб.

записаних на довжині хвилі 660 нм. Відмічено, що пролонгація часу витримки зразків при атмосферних умовах викликає зростання характерних часів τ_1 та τ_2 від 100 μs до 300 μs, одночасно з цим дисперсійний фактор зменшується від 1.0 до 0.78 – 0.82.

Закон Кольрауша-Вільямса-Ваттса, або «затягнута» експонента характеризує кінетику релаксаційних процесів у невпорядкованих та/або низькорозмірних системах [4,5]. Невпорядкованість матеріалу, яка впливає на вигляд кінетики згасання ФЛ, може бути обумовлена: (а) великим розкидом розмірів кремнієвих нанокристалітів; (б) випадковим просторовим оточенням нанокристалітів та (в) структурою їх поверхні [5].

Значення $\beta<1$ в законі «затягнутої» експоненти відповідає присутності великої кількості елементарних релаксаційних процесів (випромінювальних або безвипромінювальних), що відповідають за емісію на даній довжині хвилі.

Таким чином, «затягнута» експонента може бути представлена як суперпозиція великої кількості одно експонентних функцій. З іншого боку, наявність перехоплюючих станів (retrapping states) всередині забороненої зони також обумовлює кінетику спаду ФЛ за законом «затягнутої» експоненти, при цьому наявність невпорядкованості середовища не є необхідним фактором [6]. Враховуючи, що дисперсійний фактор β пов'язаний з густиною пасткових станів, зменшення його значення в процесі окиснення зразків може бути результатом збільшення кількості міжфазних nc-Si/arSiO$_x$ перехоплюючих станів, що відповідають за випромінювальну рекомбінацію. Збільшення кількості таких станів в процесі окиснення одночасно викликатиме зростання характерного часу релаксації.

Висновки

В роботі представлено результати експериментальних досліджень кінетики ФЛ для пресованих композитних матеріалів nc-Si/arSiO$_x$. Проаналізовано еволюцію кінетики ФЛ під час витримки зразків в атмосферних умовах. Показано, що окиснення зразків призводить до зміни закону згасання ФЛ: для окиснених зразків залежність I(t) описується сумою двох доданків, перший з яких являє собою просту експоненту, а другий – так звану «затягнуту» експоненту: $I(t)= A_1 exp(-t/\tau_1)^{\beta}+A_2 exp(-t/\tau_2)$. Збільшення часу витримки викликає зменшення значення дисперсійного фактору β та зростання характерного часу релаксації τ. Така поведінка кінетики ФЛ може бути обумовлена збільшенням кількості міжфазних nc-Si/arSiO$_x$ перехоплюючих станів, що відповідають за випромінювальну рекомбінацію.

Список використаних джерел

1 *A.Yu.Karlash*. Photoluminescence properties of silica aerogel/porous silicon nanocomposites / A.Yu.Karlash,Yu.E.Zakharko,V.A.Skryshevsky, A.I. Tsiganova, G.V. Kuznetsov // J.Phys.D: Appl. Phys. – 2010. – №48 – P.335405

2 *Anna Yu. Karlash.* Evolution of visible photoluminescence of Si quantum dots embedded in silicon oxide matrix/ Anna Yu. Karlash, Valeriy A. Skryshevsky Gennady V. Kuznetsov, Vasyl P. Kladko //`J. of Alloys and Compaunds. – 2013. – №.577. – P.283-287

3 *A. Yu. Karlash*. Impedance spectroscopy of composites based on porous silicon and silica aerogel for sensor applications/ A. Yu. Karlash, G. V. Kuznetsov, Yu.S. Milovanov, V. A. Skryshevsky// Functional Materials. – 2013. – № 20 (1). – P.110-117.

4 *Q. Guillois.* Photoluminescence decay dynamics of noninteracting silicon nanocrystals/ Q. Guillois, N. Herlin-Boime, C. Reynaud, G.Ledoux, F. Huisken// J. of Appl. Phys. – 2004. – №97. – P.3677-3682

5 *L. Pavesi.* Stretched-exponential decay of the luminescence in porous silicon/ L. Pavesi, M. Ceschini// Phys. Rev. B – 1993 – №48 – P.17625

6 *R. Chen.* Apparent stretched-exponential luminescence decay in crystalline solids/ R. Chen// J. of Lumin. – 2003. – №102-103 – P.510-518

References

1. KARLASH, A., ZAKHARKO, YU., SKRYSHEVSKY, V., TSIGANOVA, A., KUZNETSOV,G.(2010) Photoluminescence properties of silica aerogel/porous silicon nanocomposites, *J.Phys.D: Appl. Phys.,* 48, p.335405

2. KARLASH, A., SKRYSHEVSKY, V., TSIGANOVA, A., KUZNETSOV,G., KLADKO, P.,(2013) Evolution of visible photoluminescence of Si quantum dots embedded in silicon oxide matrix*, J. of Alloys and Compaunds,* 577, p.283-287

3. KARLASH, A., KUZNETSOV,G., MILOVANOV, YU., SKRYSHEVSKY, V., (2013*)* Impedance spectroscopy of composites based on porous silicon and silica aerogel for sensor applications, *Functional Materials*, 20(1), p.110-117

4. GULLOIS, Q., HERLIN-BOIME, N., REYNALD, C., (2004) Photoluminescence decay dynamics of noninteracting silicon nanocrystals, *J. of Appl. Phys.,* 97, p.3677-3682

5. PAVEZI, L., CESSINI, M., (1993) Stretched-exponential decay of the luminescence in porous silicon, *Phys. Rev. B.,* 48, p.17625

6. CHEN, R., (2003) Apparent stretched-exponential luminescence decay in crystalline solids, *J. of Lumin.,* 102-103, p. 510-518

Надійшла до редколегії 5.09.14

УДК 538.911

Кулик С.П.[1], к.ф.-м.н.

Формування тонкої плівки хрому на поверхні Si(001)

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4г,
e-mail: skulyk@univ.kiev.ua

S.P.Kulyk , Ph.D,

The thin film of chromium formation on Si (001) surface

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova ave., 4g,
e-mail: skulyk@univ.kiev.ua

Методом скануючої тунельної мікроскопії (СТМ) та спектроскопії досліджено структуру поверхніSi(001),вкритої тонким шаром хрому. Показано, що при кімнатній температурі плівка хрому на поверхні кремнію має острівцеву структуру. Провідність острівців має металевий характер, на відміну від вільних ділянок, де поверхня має напівпровідникові властивості з шириною забороненої зони 0,65еВ. Прогрів поверхні до 400°С призводить до зростання розмірів острівців в 2-3 рази, при цьому поверхня набуває властивостей напівпровідника з шириною забороненої зони 0,35еВ, що відповідає параметрам силіциду $CrSi_2$.

Ключові слова: СТМ, силіциди, структура поверхні.

The surface structure of Si(001) covered with a thin layer of chromium have been investigated by the methods of scanning tunneling microscopy (STM) and spectroscopy. Experimental studies were performed in the UHV conditions. The base pressure in the vacuum system was less than 10^{-9} torr. Samples of p-type Si (001) (10x10x0,3 mm^3) was cut from the Si wafer and after chemical treatment installed in a vacuum chamber. Surface contamination was controlled by Auger electron spectroscopy. Cleaning the surface of the sample was carried out by argon ion beam with Ei ~ 0.6 keV bombardment and subsequent annealing of the sample at about 700°C. It is shown that at room temperature the chromium film on the silicon surface has islet structure. The conductivity of the islands has a metallic character, as opposed to free sites where the surface has semiconducting properties with a band gap of 0,65eV. Annealing the surface to 400°C leads to the growth of the islands size by 2-3 times, while the surface acquires the properties of a semiconductor with a band gap of 0,35eV, corresponding to $CrSi_2$ stoichiometry.

Key Words: STM, silicides, surface structure

Статтю представив д.ф.-м.н. Скришевський В.А.

Надтонкі шари силіцидів перехідних металів, зокрема силіциду хрому інтенсивно досліджуються завдяки можливості їх використання в технології створення інтегральних схем (ІС) та гібридних напівпровідникових інтегральних схем в якості металізації, буферних шарів тощо. Вони є багатообіцяючою основою для виготовлення елементів пам'яті та оптоелектронних систем наступного покоління [1-3].

Ще одним застосуванням сполук перехідних металів в сучасній кремнієвій технології може стати застосування напівпровідникових силіцидів хрому в якості сенсорів ІЧ-випромінювання, омічних контактів та бар'єрів Шотткі. Раніше в роботах [4] було показано, що наявність субмоношарового покриття хрому на поверхні кремнію може стимулювати зростання нанометрових плівок оксиду кремнію вже при температурах трохи вище кімнатної, або навіть при кімнатній

Чиста поверхня кремнію виявляє велику реактивну здатність за рахунок наявності на поверхні обірваних зв`язків. На ній має місце нерівномірний розподіл напружень, що забезпечує інкорпорацію адсорбованих атомів Cr в приповерхневі шари підкладки. Початкові етапи процесів утворення силіциду хрому при відпалі тонких плівок хрому нанесених на поверхню кремнію (тобто при наявності надлишку кремнію) показали, що при цьому утворюється стехіометричний $CrSi_2$, який являє собою вироджений напівпровідник р- типу з непрямими зонами та шириною забороненої зони

© С.П. Кулик, 2014

0,35 еВ [1,2]. При нестачі кремнію відносно стехіометричної формули провідність набуває металевого характеру. Силіцид $CrSi_2$ вирізняється своєю високою термічною та хімічною стійкістю.

Метою даної роботи було дослідити структуру та електронні властивості надтонких плівок хрому на поверхні Si(001) методами скануючої тунельної мікроскопії та спектроскопії.

Експериментальні дослідження виконувались в робочій камері надвисоковакуумної установки. Вакуум в системі був не гірше ніж 10^{-9} мм рт.ст.

Зразки Si(001) р-типу, розмірами 10x10x0,3 $мм^3$ вирізали із пластини Si і після хімічної обробки встановлювали у вакуумну камеру. Чистоту поверхні контролювали методом електронної оже-спектроскопії. Очищення поверхні зразка здійснювалась шляхом іонного бомбардування пучком іонів аргону з енергією 0,6 кеВ і подальшим прогрівом зразка при температурі близько 700С. СТМ дослідження отриманої поверхні (рис.1) показало, що вона не ідеальна, має перепади по висоті, масштаб яких не перевищує 2-3 нанометри.

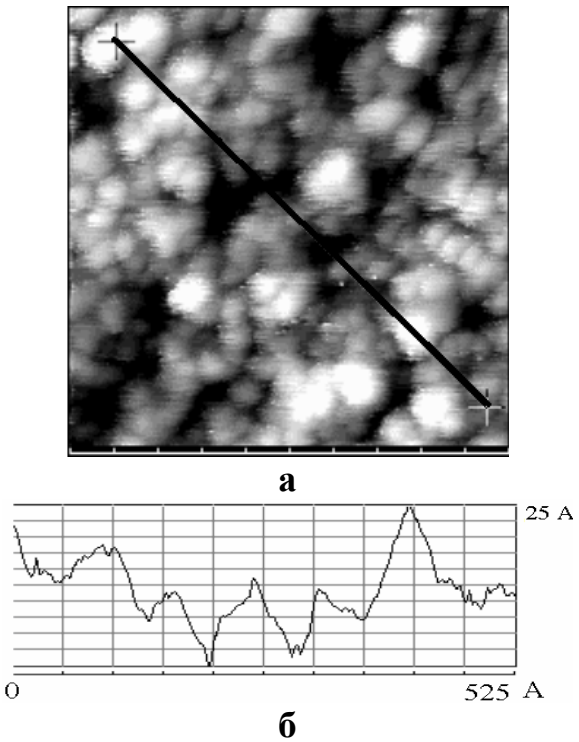


Рис. 1 СТМ зображення 500x500A^2 (а), та профіль поверхні кремнію (б) після очистки методом іонного бомбардування.

Електронні властивості даної поверхні, за даними тунельної спектроскопії, відповідають чистій поверхні кремнію з шириною забороненої зони порядку одного електронвольта (рис.2).

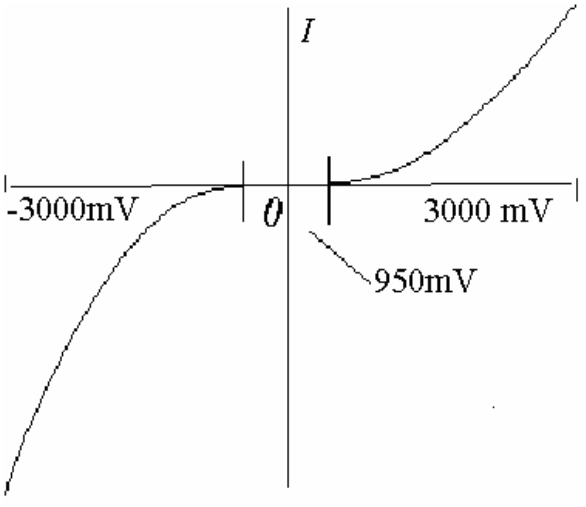


Рис. 2 Вольт-амперна характеристика тунельного проміжку вістря СТМ - поверхня кремнію. Ширина ділянки, де тунельний струм дорівнює нулю, відповідає ширині забороненої зони — 0.95еВ.

На отриману поверхню було напилено близько одного моношару хрому. Кількісна оцінка товщини напиленої плівки проведена за даними електронної Оже-спектроскопії (рис.3) з урахуванням коефіцієнтів елементної чутливості та амплітуди модуляції для піків Si та Cr.

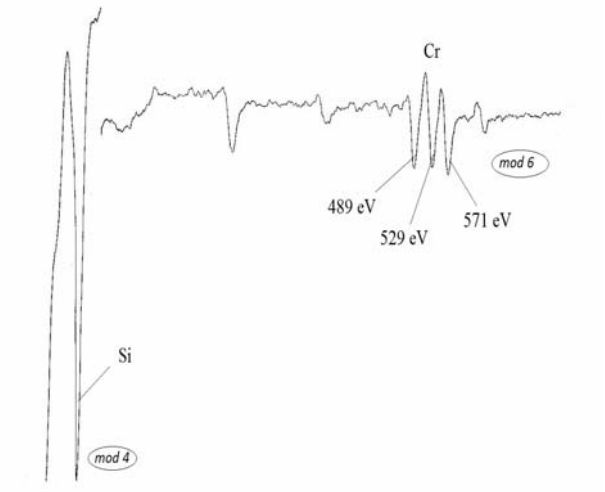
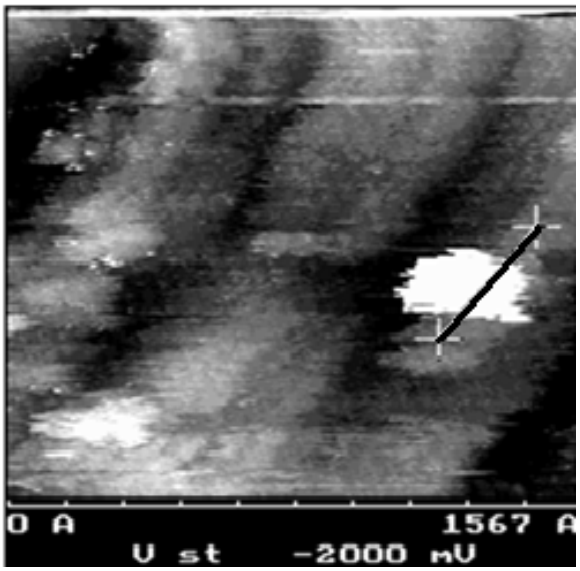
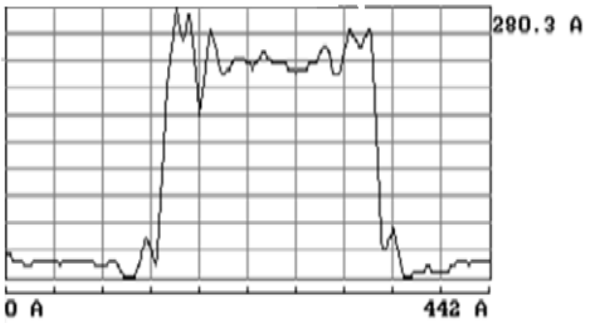


Рис. 3 Оже-спектр поверхні Si, вкритої плівкою Cr.

На поверхні Si в присутності плівки хрому, нанесеній при кімнатній температурі, за даними скануючої тунельної мікроскопії, спостерігаються острівці розмірами 200-300 Å, висотою 300-350 Å. Один з таких типових острівців наведено на рис.4.



а



б

Рис. 4 СТМ зображення 1600x1600A^2 поверхні острівцевої плівки хрому на Si(001) (а), і профіль окремого острівця за вказаним напрямком (б)

Острівці виділяються на поверхні не тільки по висоті, а ще й за електронними властивостями – вони мають металевий тип провідності, що видно з вольт-амперної характеристики тунельного проміжку, наведеного на рис 5 (крива 1), отриманої безпосередньо над острівцем. Про металевий характер даної ділянки поверхні свідчить те, що в області нульових напруг похідна відмінна від нуля. Враховуючи малу кількість присутнього на поверхні хрому та висоту острівців, можна припустити, що ми спостерігаємо результат взаємодії хрому з кремнієм. Тобто острівці є наслідком утворення силіциду хрому з дефіцитом кремнію.

За межами вказаних острівців поверхня зберігає властивості напівпровідника з шириною забороненої зони порядку 0.65eB (рис.5, крива 2).

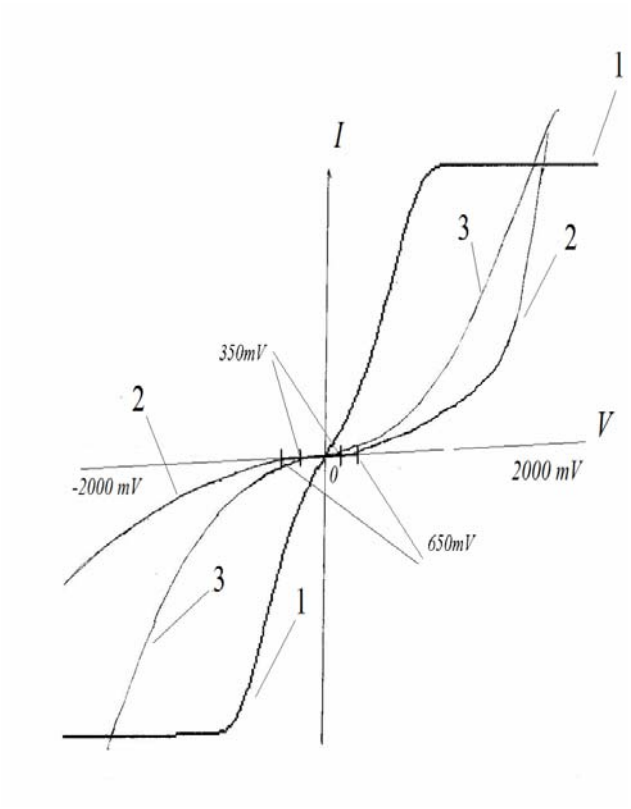


Рис. 5 Вольт-амперні характеристики, отримані в різних ділянках поверхні: 1 – над острівцем, 2 – поза острівцем до прогріву, 3 –після прогріву.

Наступним етапом роботи був прогрів поверхні до t 400 °C протягом 10 хв., оскільки при таких температурах в [4] спостерігались зміни адсорбційних властивостей даної поверхні.

Оже-спектр поверхні після прогріву залишився практично без змін, а структура острівців суттєво змінилася: спостерігалось значне збільшення розмірів острівців - по висоті до 500-900 Å, та латерально до 800-1000 Å. Також після прогріву змінилися електронні властивості поверхні: спостерігаємо подальше зменшення ширини забороненої зони до 0.35eB (рис.5, крива3). Дані спектри спостерігаються по всій поверхні.

Таким чином, в роботі показано, що при напорошені плівки хрому товщиною близько одного моношару на поверхню кремнію утворюються острівці розмірами 200-300 Å і висотою 300-350 Å. Острівці хрому мають металеві властивості. На ділянках вільних від хрому, ширина заборонена зони зменшилася

порівняно з чистою поверхнею кремнію і складала приблизно 0.65еВ. Прогрів плівки до температури 400^{o}C призвів до збільшення розмірів острівців, як за висотою так і за площею у 2-3 рази. Тунельні спектри такої поверхні свідчать про утворення поверхневого шару з шириною забороненої зони 0.35еВ, що відповідає силіциду хрому зі стехіометрією $CrSi_2$.

Список використаних джерел

1. *Galkin N.G.* Properties of $CrSi_2$ nanocrystallites grown in a silicon matrix / . Galkin N.G., Dozsa L., Turchin T.V., Goroshko D.L., et al. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2007. – **19**, № 50. – 506204.
2. *Szczech J.R.* Single-Crystal Semiconducting Chromium Disilicide Nanowires Synthesized via Chemical Vaper Transport/ Szczech J.R., Schmitt A.L., Biermann M.J., Jin S. // Chem. Mater: 2007. – **19**. – P. 3238–3243.
3. *Filonenko O.* Structure of thin $CrSi_2$ films on Si(001). / Filonenko O., Falke M., Hortenbach H., Henning A., Beddies G., Hinneberg H.-J. // Applied Surface Science.– 2004. – **227**, № 1–4. – P.341 – 348.
4. *K. A. Butariev.* Transformations in the submonolayer coatings of chromium and titanium on Si(001) / K. A. Butariev, I. P. Koval, Yu. A. Len, M. G. Nakhodkin.// Journ. of nano- and electronics physics. – 2013. – **5**, № 1. – P. 01025.

References

1. GALKIN N.G., DOZSA L., TURCHIN T.V., GOROSHKO D.L., ET AL.(2007). Properties of $CrSi_2$ nanocrystallites grown in a silicon matrix . *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2007. – 19 (50). – p.506204.
2. SZCZECH J.R., SCHMITT A.L., BIERMANN M.J., JIN S. (2007) Single-Crystal Semiconducting Chromium Disilicide Nanowires Synthesized via Chemical Vaper Transport: *Chem. Mater*: 2007. – 19. – p. 3238–3243.
3. FILONENKO O., FALKE M., HORTENBACH H., HENNING A., BEDDIES G., HINNEBERG H.-J. (2004) Structure of thin $CrSi_2$ films on Si(001). *Applied Surface Science.*– 2004. – 227 (1–4). – p.341 – 348.
4. BUTARIEV K.A., KOVAL I.P., LEN Y. A., NAKHODKIN M. G.. (2013) Transformations in the submonolayer coatings of chromium and titanium on Si(001) *Journ. of nano- and electronics physics*. – 2013. – 5(1). – p. 01025.

Надійшла до редколегії 02.09.14

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 539.2, 541.132

Атамась Н.О.[1], д.ф.м.н, пров.н.с.
Васил'єва Д.Д.[2], студ.

Вплив концентрації на енергетичні та структурні властивості водного розчину NaBr при T = 300К

[1,2]Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13
e-mail: [1]atamasphys@mail.univ.kiev.ua

Atamas N.O.[1], Dr. Sci.,
Vasylieva D.D.[2] stud.

Effect of concentration on energetics and structural properties of aqueous solution of NaBr at T = 300 K

[1,2]Kyiv Nation*a*l Taras Shevchenko University,
01601 Kyiv, str. Volodymyrska 64/13
e-mail: [1]atamasphys@mail.univ.kiev.ua

Метод молекулярної динаміки застосовано для дослідження впливу концентрації розчиненого однозарядного електроліту NaBr *на енергетичні та структурні властивості водного розчину при* T = 300*K. Одержано, що збільшення концентрації* NaBr *призводить до зменшення значень* $<E_{сум}>$ *та* $<E_{Кулон}>$. *Виділено області концентрацій* ($0{,}0 \le X_{NaBr} \le 0{,}2$; $0{,}2 \le X_{NaBr} \le 0{,}3$; $0{,}3 \le X_{NaBr} \le 0{,}4$), *у межах яких спостерігається зміна локальної структури рідини. На основі отриманих РФР проаналізовано зміну локальної структури розчину, встановлено вплив концентрації електроліту на характеристики водних кластерів, водно-іонних та іонних систем у досліджених розчинах.*

Ключові слова: водний розчин електроліту, молекулярна динаміка, локальні структура,енергія міжмолекулярної взаємодії

The method of molecular dynamics is applied to study the influence of dissolved electrolyte NaBr *for singly charged energetic and structural properties of the aqueous solution at* T = 300*K. Obtained that increasing* NaBr *concentration leads to a decrease in the values of <Esum> and <Ecoul>. Highlight area concentrations* ($0{,}0 \le X_{NaBr} \le 0{,}2$; $0{,}2 \le X_{NaBr} \le 0{,}3$; $0{,}3 \le X_{NaBr} \le 0{,}4$), *within which there is a change lokalnoyii structure of the liquid. Based on RDF analyzed the change of the local structure of the solution. increasing the salt concentration in solution leads to changes in the number of water molecules, forming clusters. Specifically, for concentration less than* $X_{NaBr} \approx 0{,}2$ *exist in solution system with 2 water molecules. That is, these concentrations in the studied liquid system ions and cations dissolved in water lead to the rupture of hydrogen bonds between mesh water molecules. Increase of salt to* $X_{NaBr} \approx 0{,}3$ *leads to an increase in the number of water molecules in clusters of water molecules to three, indicating a stabilization of the solution and the existence in it of water structure similar to the "pure" water. The data obtained show that the dissolution of salt in water leads to discontinuities grid hydrogen bonds between water molecules and structures with significant restructuring of water molecules, the shape and number of molecules that make them dependent on the concentration.*

Key Words: aqueous electrolyte, MD, the local structure, energy of intermolecular interaction,

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вплив іонів, їх концентрації на процеси формування структури води є важливим для розуміння стабільності протеїнів, реакції ензимів є незвичайно важливим та актуальним. В останні роки було зроблено значний внесок у розробку мікроскопічних теорій рідинних систем, що дозволяють задовольнити запити біохімії та молекулярної біології [1]. У зв'язку з тим, що, з одного боку, вода та іони є невід'ємною складовою блоків для розрахунків бімолекулярних систем [2], а з іншого боку прямо застосовуються для опису властивостей протеїнів, наприклад, опису проникнення іонів крізь мембрани у водних розчинах протеїнів, необхідність коректного опису їх взаємодії між собою не викликає сумнівів. Коректний опис взаємодії біомолекул вимагає розуміння механізмів міжмолекулярних процесів на молекулярному рівні, що можливо зробити з використанням чисельного моделювання, а саме

© Н.О. Атамась, Д.Д. Васил'єва, 2014

з використанням методу молекулярної динаміки, який було реалізовано із використанням програмного пакету DL_POLY_4.5.[3] Використання комп'ютерного моделювання дозволяє одержати важливі дані відносно процесів гідратації, структури водних розчинів електролітів, у нашому випадку однозарядного електроліту NaBr, на мікрорівні.

Проаналізуємо одержані в результаті компютерного експерименту дані:

На рис. 1 представлено концентраційну залежність значень середньої енергії міжмолекулярної взаємодії, її Ван – дер – Ваальсівську та кулонівську складові у водному розчині NaBr при T = 300 K.

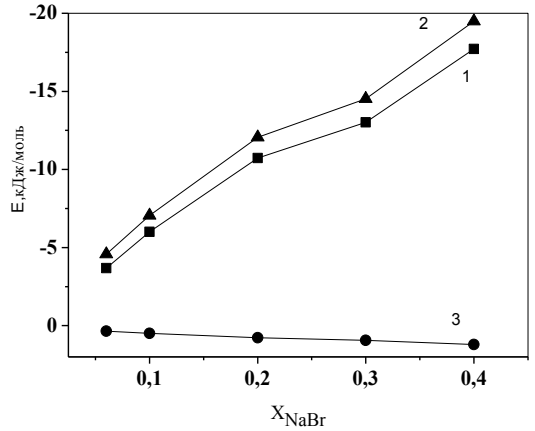


Рис. 1. Концентраційна залежність середньої сумарної енергії міжмолекулярної взаємодії ($<E_{сум}>$), Леннард-Джонсової ($<E_{ВдВ}>$) та кулонівської ($< E_{Кулон} >$) складових у водному розчині NaBr від концентрації NaBr при T = 300 K (1 - $< E_{сум}>$, 2 - $< E_{ВдВ}>$, 3 - $< E_{Кулон} >$)

Одержані дані показують, що збільшення концентрації солі призводить до збільшення значень $<E_{ВдВ}>$ до значень $<E_{сум}>$, яке свідчить про збільшення ролі близькодіючих взаємодій у системі із збільшенням концентрації солі у розчині. В свою чергу, збільшення концентрації призводить до зменшення значень $<E_{сум}>$ та $<E_{Кулон}>$. Одержаний результат свідчить про зменшення ролі далекодіючих взаємодій у системі із збільшенням концентрації, що протирічить загальноприйнятим уявленням про збільшення ролі кулонівських взаємодій із збільшенням концентрації солі у воді.

Аналіз концентраційної залежності $< E_{Кулон}>$ та $< E_{сум} >$ показує, що зменшення значень енергій відбувається не лінійно із збільшенням вмісту солі у розчині. А саме, існує можливість виділити декілька областей концентрацій: $0{,}0 \le X_{NaBr} \le 0{,}2$; $0{,}2 \le X_{NaBr} \le 0{,}3$; $0{,}3 \le X_{NaBr} \le 0{,}4$. Слід зазначити, що у областях $0{,}0 \le X_{NaBr} \le 0{,}2$ та $0{,}3 \le X_{NaBr} \le 0{,}4$ значення $<E_{сум}>$ та $<E_{Кулон}>$ змінюються значним чином. В свою чергу, у області $0{,}3 \le X_{NaBr} \le 0{,}4$ фіксується незначна зміна значень $<E_{сум}>$ та $< E_{Кулон}>$, що свідчить про деяку стабілізацію структурних утворень у досліджуваних системах у цій області концентрацій.

Концентраційна залежність теплоємності досліджуваних водно-електролітних систем проводилась на основі аналізу флуктуацій повної середньої енергії взаємодії розчину вода- NaBr [4]:

$$C_V = \left(\frac{\left\langle E_{сум} \right\rangle^{2NVT} - \left\langle \Delta E_{сум^2} \right\rangle}{nN_A k_B T^2} \right), \qquad (1)$$

де $<E_{сум}>$ – повна середня енергія міжмолекулярної взаємодії розчину, k_B – константа Больцмана, N_A – число Авогадро, n-число частинок у досліджуваній системі.

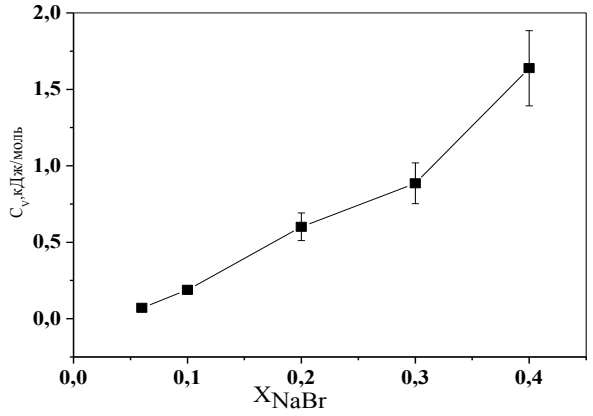


Рис. 2. Концентраційна залежність теплоємності (C_V) водного розчину NaBr від концентрації NaBr при T = 300K.

Одержана концентраційна залежність теплоємності водного розчину NaBr при T = 300K представлена на рис. 2. Розраховані значення теплоємності за умови сильного розведення $X_{NaBr} \le 0{,}1$ відрізняються від значень теплоємності води [5], що пояснюється процесами перебудови сітки водневих зв'язків між молекулами води при розчиненні та русі в ній не зв'язаних між собою іонів і катіонів. За концентрацій в околі $X_{NaBr} \approx 0{,}4$ значення теплоємності досліджуваних систем майже досягає значення теплоємності води, що свідчить про закінчення перебудови сітки водневих зв'язків молекул води між собою. Дослідження впливу *концентрації однозарядних натрієвих електролітів на процеси формування локальної структури* у досліджуваній системі доцільно

почати з аналізу впливу на взаємодію між молекулами води. На рис. 3. представлено РФР, що характеризують взаємодію молекул води між собою. Їх аналіз показує, що збільшення вмісту солі у досліджуваній системі призводить до збільшення ймовірності взаємодії молекул води між собою без зміни відстані між взаємодіючими молекулами, яка складає $(2{,}8 \pm 0{,}1)$ Å. За концентрацій $X_{NaBr} \geq 0{,}3$ структура рідинної системи стає більш впорядкованою, внаслідок чого РФР фіксують другу гідратаційну оболонку (4,9 Å ≤ R ≤ 7,3 Å).

РФР, які описують ймовірність знаходження атомів кисню та водню молекул води у водних розчинах NaBr, дозволяють стверджувати, що довжина водневих зв'язків між молекулами води не змінюється із збільшенням концентрації солі у воді, на що вказує положення першого максимуму РФР. Кількісно визначити вплив концентрації на зміну характеристик агрегатів у досліджуваній системі дозволяє аналіз числа найближчих сусідів. Встановлено, що у випадку розчинення NaBr у воді збільшення числа найближчих сусідів відбувається лінійно із збільшенням концентрації солі у розчині. За концентрацій в околі $X_{NaBr} \approx 0{,}4$ за рахунок взаємодії іонів та катіонів між собою утворюються системи із 35 частинок. В цей же час за концентрації $X_{NaBr} \approx 0{,}4$ існують системи, що складаються: із катіонів Na, що оточені ~ 20 молекулами води; із аніонів Br, що оточені 12 молекулами води;та кластерів із чотирьох молекул води.

Особливості впливу концентрації солі на формування локальної структури водних систем вода- NaBr дозволяє зробити аналіз РФР,

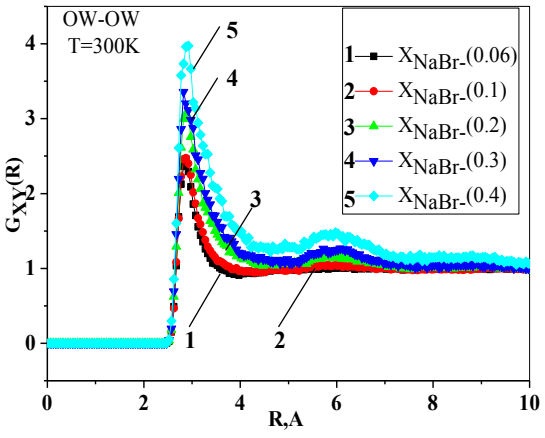


Рис. 3. Концентраційна залежність РФР для ймовірності знаходження атомів кисню молекул води у водних розчинах NaBr при T = 300 K

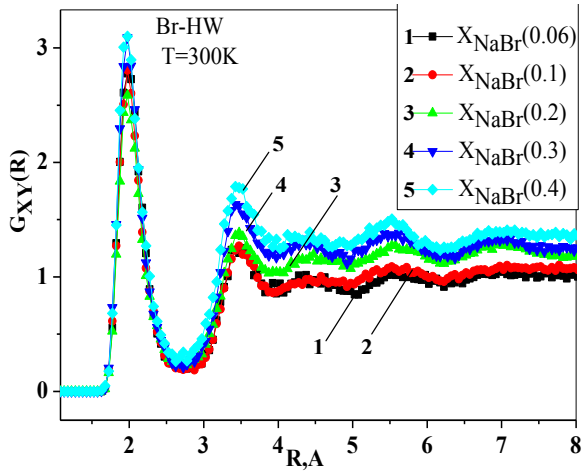


Рис. 4. Концентраційна залежність РФР для ймовірності знаходження аніону Br та атомів водню молекул води у водних розчинах NaBr при T = 300 K.

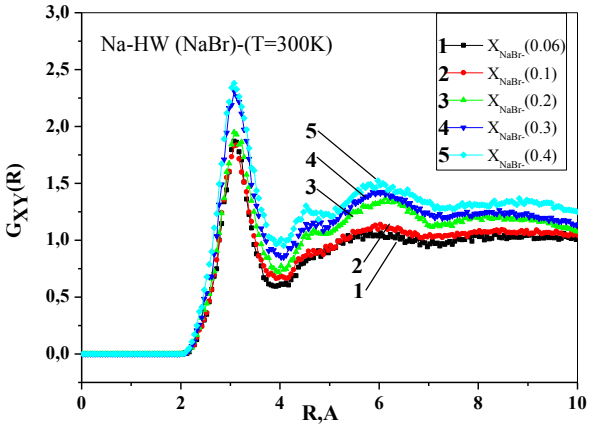


Рис. 5. Концентраційна залежність РФР для ймовірності знаходження Na^+ та атомів водню молекул води у водних розчинах NaBr при T = 300 K

які описують ймовірності взаємодій Na....O^W , Br ....O^W , Na....H^W , Br -....H^W. Особливу увагу привертає до себе Br ....H^W(рис. 4), за рахунок якої утворюються стійкі воднево-зв'язані комплекси [6] Br ....H^W... O^W з довжиною 2.1 Å, на яку не впливає зміна концентрації електроліту у розчині. Навколо аніону Br можуть формуватись п'ять гідратаційних оболонок, які значним чином впливають на зміну сітки водневих зв'язків у досліджуваних системах. Суттєвий вплив на формування локальної структури рідини у досліджуваних системах також вносить притягальна взаємодія Na^+....O^W, ймовірність якої перевищує ймовірність Br ....H^W. Найбільш сильний вплив на формування локальної структури розчину вносить взаємодія між аніонами та катіонами, РФР для ймовірності

якої надано на рис. 5. Ймовірність цього класу взаємодій зменшується із збільшенням концентрації електроліту у досліджуваній системі, що зв'язано із зменшенням числа вільних іонів та катіонів при збільшенні концентрації. Найбільш сильний вплив на формування локальної структури розчину вносить взаємодія між аніонами та катіонами.

У випадку розчинення NaBr у воді збільшення числа найближчих сусідів відбувається лінійно із збільшенням концентрації солі у розчині. За концентрацій в околі $X_{NaBr} \approx 0{,}4$ за рахунок взаємодії іонів та катіонів між собою утворюються системи із 35 частинок. В цей же час за концентрації $X_{NaBr} \approx 0{,}4$ існують системи, що складаються: із катіонів Na, що оточені ~ 20 молекулами води; із аніонів Br, що оточені 12 молекулами води;та кластерів із чотирьох молекул води.

Висновки

Збільшення концентрації солі у розчині призводить до зміни числа молекул води, що утворюють кластери. А саме, за концентрацій менших ніж $X_{NaBr} \approx 0{,}2$ у розчині існують системи із 2 молекул води. Тобто за цих концентрацій у досліджуваній рідинній системі іони та катіони, що розчинені у воді призводять до розриву сітки водневих зв'язків між молекулами води. Збільшення вмісту солі до $X_{NaBr} \approx 0{,}3$ призводить до збільшення числа молекул води у кластерах із молекул води до трьох, що свідчить про стабілізацію структури розчину та існування в ньому структури води подібної до «чистої» води. Одержані дані свідчать, що розчинення у воді солі призводить до розривів сітки водневих зв'язків між молекулами води та суттєвої перебудови утворень із молекул води, форма та число молекул які їх створюють залежить від концентрації.

Список використаних джерел

1. *Заболоцкий В.И.* Перенос ионов в мембранах / В.И. Заболоцкий, В. В. Никоненко – Москва: Наука, 1996. – 392 с.

2. *Рубин А.Б.* Биофизика. Биофизика клеточных процессов / Рубин А.Б. – Москва: Высшая школа. – 1999. - 464 с.

3. *Forester T. R*. The DL-POLY-4.05. Reference Manual and Version 4.05 edition [Електронний ресурс] / T. R. Forester, W. Smith. – Warrington: CCLRC, Daresbury Laboratory. – 1995. – 342p. Режим доступу: http://www.cse.scitech.ac.uk/ccg/software/DL_POLY/

4. *Allen M. P*. Computer Simulation of Liquids / M. P. Allen, D. Y. Tildesley. – Oxford: Clarenton Press. – 2001. – 620 p.

5. *Лифшиц Е. М.* Теплоёмкость // Физическая энциклопедия / Гл. ред. А. М. Прохоров. — М.: Большая Российская энциклопедия, 1998. — 760 с.

6. *Hribar L. B.* Ion and Hydrophobe Effects on the Structure of Water/ Hribar L. B. // Ionic Soft Matter: Novel Trends in Theory and Applications: NATO Advanced Research Workshop. April 2004, Lviv, Ukraine: abstracts. – Lviv. 2004. – P. 35.

References

1. ZABOLOZKYI V.I.(1996) Ion transport membranes. Moskwa: Nauka.

2. RUBIN A.B. (1999) Biophysics. Biophysics of cellular processes. Moskwa: Visshaya shkola.

3. FORESTER T.R.(1995) The DL-POLY-4.05. Reference Manual and Version 4.05 edition Warrington: CCLRC, Daresbury Laboratory.

4. ALLEN M.P. (2001) Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarenton Press.

5. LIFSHIZ E.M.. (1998) Heat Capacity // Physical encyclopedia. Moskwa.: Great Russian Encyclopedia.

6. HRIBARR L. B. (2004) Ion and Hydrophobe Effects on the Structure of Water. In Ionic Soft Matter: Novel Trends in Theory and Applications: NATO Advanced Research Workshop. Lviv, Ukraine: abstracts. – Lviv. 2004. – P. 35.

Надійшла до редколегії 10.07.14

УДК: 536, 539.1

Власенко Т.С.[1], асп.,
Сисоєв В.М.[2], д.ф.м.н.,проф.

Вплив зовнішніх факторів на структуру двокомпонентної системи в стаціонарному стані

[1,2]Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,
e-mail: sonychko@bigmir.net

T.S. Vlasenko[1], PhD student,
V.M. Sysoev[2], Dr. Sci., Prof.

Influence of external factors on the two-component system structure in the steady state

[1,2]Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: sonychko@bigmir.net

Основна ідея роботи полягає в теоретичному дослідженні впливу зовнішніх факторів на задану дво-компонентну рівноважну термодинамічну систему, що в результаті переходить до стаціонарного нерівноважного стану, який характеризується наявністю скалярних потоків. В рамках запропонованого підходу отримано систему інтегро-диференційних рівнянь для парних кореляційних функцій, що співпадають з другими рівняннями ланцюжка Боголюбова - Борна - Грина - Кирквуда – Ивона (ББГКІ), але включає в себе різні ефективні температури.Така подібність дозволяє використання звичайних інтегро-диференційних рівнянянь для парної кореляційної функції для розрахунку структурних та термодинамічних властивостей такої системи з врахуванням ефективних температур, характерних для утвореної системи, що записуються через збурену (нерівноважну) функцію розподілу Максвела за імпульсами. Отримані теоретичні результати порівняно з сучасними експериментальними дослідженнями впливу опромінення на електропровідність. Враховуючи малу кількість використаних припущень, результати є у гарній відповідності.

Ключові слова: ланцюжок ББГКІ, інтегро-диференційні рівняння, стаціонарний нерівноважний стан, парна кореляційна функція, ефективна температура.

The main objective of the work is studying of external factors influence on a given two-component equilibrium thermodynamic system resulting in the system evolution to the nonequilibrium steady state characterized by the presence of scalar fluxes. Within the suggested approach system of integro-differential equations for the pair correlation function, that have the same form as second equations of Bogoliubov - Born - Green - Kirkwood - Yvon (BBGKY) chain, but include the different effective temperature, is obtained. Such a similiarity suggests that in order to calculate the structural and thermodynamic properties of the system one can use the usual integro-differential equations for pair correlation function accounting for effective temperatures characteristic to the system and expressed through the disturbed (nonequilibrium) Maxwellian momentum distribution function. Comparison of the obtained theoretical results with the recent experimental data on electroonductivity changes under the irradiation is conducted. Provided analysis shows good correspondence of the theoretical predictiond with experimental data in respect to minimal set of assumpyions used.

Key Words: BBGKY chain, integro-differential equation, stationary nonequilibrium state, the pair correlation function, effective temperature

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

На сьогоднішній день швидкими темпами розвивається фізика реакторів. Цікавим напрямком дослідження є розробка реакторів четвертого покоління, так званих рідкосольових реакторів (РСР). РСР – це атомні реактори, робочою речовиною яких є розплав радіоактивних солей. Тому вкрай важливим є розуміння фізичних процесів, що відбуваються в рідинах під дією радіаційного випромінювання.

В роботі розглядається зовнішній вплив рівномірно розподілених у просторі зарядженних частинок на двокомпонентну рівноважну систему. В усіх випадках в системі порушується

© Т.С. Власенко, В.М. Сисоєв, 2014

розподіл Максвела за швидкостями [1] і система намагається повернутися до рівноважного стану.

Відомо, що активні частинки вносять в таку систему від'ємну ентропію, яка компенсується виробництвом ентропії в самій системі [2-4]. Виникає важливе питання, як змінюються при цьому структурні характеристики системи, зокрема, парна функція розподілу.

Теоретична модель

Запишемо ланцюжок Боголюбова для просторово-часових функцій розподілу $F_n\ \vec{r},\vec{p},t$ [5]:

$$\frac{\partial F_n\ r_1^i,r_2^j,r_3^k,p_1^i,p_2^j,p_3^k,t}{\partial t} = \left[H^{\ n},F_n\ r_1^i,r_2^j,r_3^k,p_1^i,p_2^j,p_3^k,t\ \right] + \rho\sum_{i=1}^{n}\int\frac{\partial\Phi\ \left|r_i-r_{n+1}\right|}{\partial r_i} \times\frac{\partial F_{n+1}\ r_1^i,r_2^j,r_3^k,p_1^i,p_2^j,p_3^k,t}{\partial p_i}\,dr_{n+1}dp_{n+1}, \tag{1}$$

де $H^{\ n}$ - функція Гамільтона замкнутої системи з n частинок, $F_n\ r_1^i,r_2^j,r_3^k,p_1^i,p_2^j,p_3^k,t$ - нерівноважна потрійна функція розподілу, $\Phi\ \left|r_i-r_{n+1}\right|$ - потенціал взаємодії структурних елементів.

У якості модельної розглянемо двокомпонентну систему [6]. Такий вибір модельної системи можна легко узагальнити на багатокомпонентну систему, а однокомпонентна - це лише окремий випадок [7].

В загальному випадку для опису структурних характеристик систем достатньо знати парну функцію розподілу $F_2\ \vec{r}_1,\vec{r}_2$, яка не залежить від часу. Отже, для широкого класу задач ми можемо обірвати ланцюжок (1) на другому рівнянні. Існує багато різних методів для визначення парної функції розподілу: експериментальні, теоретичні та методи комп'ютерного моделювання [8,9]. Однак, за допомогою більшості з них можна розрахувати цю функцію в рівноважному стані, тому ці методи не підходять для опису системи в стаціонарному нерівноважному стані. Метою даної роботи є визначення $F_2\ \vec{r}_1,\vec{r}_2$ для деформованого розподілу в імпульсному просторі у результаті зовнішнього впливу на систему.

З рівняння (1) друге рівняння ланцюжка Боголюбова для двокомпонентної системи в стаціонарному стані буде мати вигляд:

$$\begin{aligned}0 =& \Big(\frac{\partial\Phi\left(\left|r_1^i-r_2^j\right|\right)}{\partial r_1^i}\frac{\partial F_2(r_1^i,r_2^j,p_1^i,p_2^j)}{\partial p_1^i} - \frac{p_1^i}{m_i}\frac{\partial F_2(r_1^i,r_2^j,p_1^i,p_2^j)}{\partial r_1^i}\Big)\\ &+\Big(\frac{\partial\Phi\left(\left|r_1^i-r_2^j\right|\right)}{\partial r_2^j}\frac{\partial F_2(r_1^i,r_2^j,p_1^i,p_2^j)}{\partial p_2^j} - \frac{p_2^j}{m_j}\frac{\partial F_2(r_1^i,r_2^j,p_1^i,p_2^j)}{\partial r_2^j}\Big)\\ &+\rho_k\sum_{i=1}^{n}\int_{i,j,k=1,2}\frac{\partial\Phi\left(\left|r_1^i-r_3^k\right|\right)}{\partial r_1^i} \times\frac{\partial F_3(r_1^i,r_2^j,r_3^k,p_1^i,p_2^j,p_3^k)}{\partial p_1^i}\,dr_3^k dp_3^k\\ &+\rho_k\sum_{i=1}^{n}\int_{i,j,k=1,2}\frac{\partial\Phi\left(\left|r_2^j-r_3^k\right|\right)}{\partial r_2^j} \times\frac{\partial F_3(r_1^i,r_2^j,r_3^k,p_1^i,p_2^j,p_3^k)}{\partial p_2^j}\,dr_3^k dp_3^k\end{aligned} \tag{2}$$

де m_i - маса структурного елементу.

Дійсно, в стаціонарному випадку рівняння (2) перетворюється на суму двох рівнянь, за умови факторизації $F_2\ \vec{r},\vec{p}\ = g_2\ \vec{r}\ f_2\ \vec{p}\ ,$ кожне з яких являється рівнянням ланцюжка Боголюбова у випадку нерівноважного стану. Запишемо рівняння для однієї підсистеми:

$$\begin{aligned}0 =& \Big(\frac{\partial\Phi\ \left|r_1^i-r_2^j\right|}{\partial r_1^i}\frac{\partial f_2\ p_1^i,p_2^j}{\partial p_1^i}\,g_2\ r_1^i,r_2^j - \frac{p_1^i}{m_i}\frac{\partial g_2\ r_1^i,r_2^j}{\partial r_1^i}\,f_2\ p_1^i,p_2^j\ \Big)\\ &+\rho_k\sum_{i=1}^{n}\int_{i,j,k=1,2}\frac{\partial\Phi\ \left|r_1^i-r_3^k\right|}{\partial r_1^i} \times\frac{\partial f_3\ p_1^i,p_2^j,p_3^k}{\partial p_1^i}\,g_3\ r_1^i,r_2^j,r_3^k\ dr_3^k dp_3^k\end{aligned} \tag{3}$$

Інтегруючи (3) за p_1^i,p_2^j, отримаємо модифіковане рівняння ББГКІ для випадку нерівноважного стаціонарного стану.

$$kT_{eff}^{ij}\frac{\partial g_2\ \ r_1^i, r_2^j}{\partial r_1^i}+\frac{\partial\Phi\ \ \left|r_1^i-r_2^j\right|}{\partial r_1^i}g_2\ \ r_1^i, r_2^j$$
$$+\rho_k\sum_{i=1}^{n}\int_{i,j,k=1,2}\frac{\partial\Phi\ \ \left|r_1^i-r_3^k\right|}{\partial r_1^i}g_3\ \ r_1^i, r_2^j, r_3^k\ \ dr_3^k dp_3^k \quad (4)$$

kT_{eff}^{ij} визначається співвідношенням:

$$kT_{eff}^{ij}\int\frac{\partial f_2\ \ p_1^i, p_2^j}{\partial p_1^i}\partial p_1^i\partial p_2^j = -\int\frac{p_1^i}{m_i}f_2\ \ p_1^i, p_2^j\ \ \partial p_1^i\partial p_2^j \quad (5)$$

З (5) можна визначити ефективні температури системи в загальному випадку.

Експериментальне підтвердження

В цій роботі ми зосередили увагу на електричних властивостях рідин, а саме на електропровідності, що залежить від миттєвої структури рідини [10]. Припустимо, що стаціонарний нерівноважний стан можна розглядати як нескінченну послідовність подібних миттєвих структур.

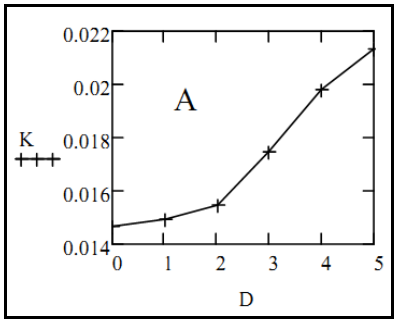


Рис. 1. Залежність питомої електропровідності розчину KCl 0,001 М від дози γ-опромінювання [11].

З рис.1 видно, що питома електропровідність KCl концентрацією 0,01М до опромінення становила $K_0 = 0{,}15$ Ом$^{-1}$м$^{-1}$ (з урахуванням лінійної концентраційної залежності питомої електропровідності), що відповідає температурі (Табл.1) $T_0 = 301$K, після опромінення $K = 0{,}215$ Ом$^{-1}$м$^{-1}$ (з урахуванням лінійної концентраційної залежності питомої електропровідності), що відповідає температурі нерівноважної системи (Табл.1) $T = 323$K. Таким чином, для розбавленого розчину KCl концентрацією 0,001М ефективна температура буде дорівнювати $kT_{eff} \approx 1{,}07kT$.

Таблиця 1

Температурна залежність питомої електропровідності для розчину KCl концентрацією 0,01М [12]

T	K	T	K	T	K
°C	Ом$^{-1}$м$^{-1}$	°C	Ом$^{-1}$м$^{-1}$	°C	Ом$^{-1}$м$^{-1}$
28	0,1496	38	0,1783	48	0,2073
30	0,1552	40	0,1841	50	0,2131
32	0,1609	42	0,1899	52	0,2189
34	0,1667	44	0,1957	54	0,2247
36	0,1725	46	0,2015		

Аналогічно для концентрованого розчину KCl концентрацією 1,2М з експериментальних даних ($K_0 = 10{,}784$Ом$^{-1}$м$^{-1}$ до опром., $K = 10{,}542$Ом$^{-1}$м$^{-1}$ після опром. [11]) ефективна температура буде дорівнювати $kT_{eff} \approx 1{,}005kT$.

З отриманих результатів бачимо, що у випадку розбавлених розчинів ефективна температура більш суттєво відрізняється від вимірювальної температури системи у порівнянні з концентрованим розчином. Відповідно, в рамках запропонованого підходу можна сказати, що зміни миттєвої структури є більшими для системи з меншою концентрацією.

Така якісна картина відповідає фізичним процесам, що проходять у системі. Так за однакових доз радіаційного опромінення кількість частинок зі зміненими швидкостями буде близькою за різних концентрацій. Загальна ж кількість частинок, які враховуються в розподілі за швидкостями, буде більшою. Відповідно вплив частинок зі зміненими швидкостями на загальний розподіл буде меншим для систем з більшою концентрацією.

Висновки

Отримані результати свідчать про те, що зміна термодинамічних властивостей двокомпонентної системи під дією зовнішніх факторів відбувається в результаті відхилення функції розподілу за імпульсами від максвелівського розподілу, що в свою чергу, призводить до зміни структурних характеристик. При цьому в двокомпонентній системі виникає декілька ефективних температур, що можна пояснити різною дією зовнішнього поля на функції розподілу по імпульсах підсистем.

Для випадку розбавлених розчинів ефективна температура більш суттєво відрізняється від вимірювальної температури системи у порівнянні з концентрованим розчином.

Список використаних джерел

1. *Kolesnichenko Ya.I.* Distribution Function For Nuclear Fusion Reaction Products In A Stationary Thermonuclear Reactor/ Ya.I. Kolesnichenko // Nuclear Fusion. –1975. – Vol. 15. – P. 35 – 37.

2. *Perez-Madrid A.* Nonequilibrium entropy. Characterization of stationary states/ A. Perez-Madrid // Energy.–2007.–Vol.32.–P.301–305.

3. *David Ruelle* Extending the definition of entropy to nonequilibrium steady states/ David Ruelle // Proc Natl Acad Sci USA. – 2003. – Vol.100 .– P.3054–3058.

4. *Giovanni Gallavotti* Entropy production and thermodynamics of nonequilibrium stationary states: A point of view / Giovanni Gallavotti // CHAOS. – 2004. – Vol.14, No 3.– P. 680–690.

5. *Гуров К.П.* Основание кинетической теории (метод Боголюбова) / К.П. Гуров. – Москва: Наука, 1966. – 352с.

6. *Власенко Т.С.* Влияние внешнего воздействия на парную функцию распределения в стационарном состоянии/ Т.С. Власенко // Письма в ЖЕТФ. – 2014. – Т. 99, Вып. 5. – С. 311-313.

7. *Власенко Т.С.* Зміна структурних характеристик рідинної системи під дією опромінення./ Т.С. Власенко, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сисоєв // Вісник Київського Національного Університету Імені Тараса Шевченка. – 2013. - №2.- С. 287-291.

8. *Sozzi C.* Measurements of Electron Velocity Distribution Function // AIP Conf. Proc.- 2008.- V.98, No 73.- P. 1-8.

9. *Журавлёв В.М.* Модели эволюции распределения частиц по энергии в пространстве скоростей/ В.М. Журавлёв, А.В. Орищенко и др. // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки.- 2009.- №1.- С.121-126.

10. *Фишер И.З.* Статистическая теория гидкостей / И.З. Фишер – Москва: Государственное издательство физико-математической литературы, 1961.- 280с.

11. *Танасюк Д.А.* Роль структуры растворов электролитов при гамма-облучении и ее влияние на электропроводность и pH растворов/ Д.А. Танасюк, Є.П. Магомедбеков и др.// Электронный научный журнал "Исследовано в России". – 2010. – Т.61. – С. 798-814.

12. *Измайлов Н.А.* Электрохимия растворов / Н.А. Измайлов. – Москва: Химия, 1966. – 576 с.

References

1. KOLESNICHENKO, Ya.I. (1975) Distribution Function For Nuclear Fusion Reaction Products In A Stationary Thermonuclear Reactor. *Nuclear Fusion*. 15. p. 35 – 37.

2. PEREZ-MADRID, A. (2007) Nonequilibrium entropy. Characterization of stationary states. *Energy*. 32. p.301–305.

3. DAVID RUELLE (2003) Extending the definition of entropy to nonequilibrium steady states. *Proc Natl Acad Sci USA*. 100. p.3054–3058.

4. GIOVANNI GALLAVOTTI (2004) Entropy production and thermodynamics of nonequilibrium stationary states: A point of view. *CHAOS*. 14(3). p. 680–690.

5. GUROV K.P. (1966) *The basis of the kinetic theory (Bogolyubov's method)*. Moscow: Nauka.

6. VLASENKO, T.S. (2014) Effect of an External Action on a Pair Distribution Function in a Steady State . *JETP Letters*. 99(5). p. 311-313.

7. VLASENKO, T., GAVRYUSHENKO, D., SYSOEV, V. (2013) The structural characteristics changes of liquid systems under the irradiation. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv*. 2. p. 287-291.

8. SOZZI, C. (2008) Measurements of Electron Velocity Distribution Function *AIP Conf. Proc*. 98 (73). p. 1-8.

9. ZHURAVLEV, V., ORISCHENKO, A. AND OTHERS. (2009) Models of evolution of the particle distribution in energy in the velocity space. *News of higher educational institutions. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 1. p.121-126.

10. FISHER, I. (1961) *Liquids statistical theory*. Moscow: Gosudarstvennoe izdanie fiziko-matematicheskoi literatury.

11. TANASJUK, D., MAGOMEDBEKOV, E. AND OTHERS. (2010) Role structure of electrolyte solutions with gamma irradiation and its effect on the electrical conductivity and pH of the solutions . *Electronic scientific journal "Investigated in Russia."*. 61. p. 798-814.

12. IZMAILOV N. (1966) Elektrical chemistry of solutions. Moscow: Himiia.

Надійшла до редколегії 09.09.2014

УДК 681.3.062

Горбар Е.В., д.ф.-м.н., с.н.с.

Аксіальний струм в моделі Намбу-Йона-Лазініо у зовнішньому магнітному полі

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр.-т Глушкова 4, e-mail: gorbar@bitp.kiev.ua

E.V. Gorbar, Dr. Sci.

Axial current in dense Nambu-Jona-Lasinio model in a magnetic field

[1]Department of Physics, Taras Shevchenko National Kyiv University, 03680, Kyiv, Glushkov av. 4, e-mail: gorbar@bitp.kiev.ua

Досліджено аксіальний струм в нормальному стані релятивістської матерії в моделі Намбу-Йона-Лазініо у зовнішньому магнітному полі в першому порядку теорії збурень. Показано, що існує поправка пропорційна хімічному потенціалу до топологічного внеску у вільній теорії, яка обумовлена взаємодією.

Ключові слова: аксіальний струм, магнітне поле, модель Намбу-Йона-Лазініо

The properties of the normal ground state of relativistic matter in a magnetic field are examined within the framework of the Nambu-Jona-Lasinio model. The axial current in the normal state of this model is studied in the first order of perturbation theory in the four-fermion coupling constant and in the linear order in the magnetic field. Contrary to the conventional wisdom suggesting that the axial current should be exactly fixed by the chiral anomaly relation and is described by the topological contribution in the free theory, we found that there exists a correction to the topological contribution in the free theory. This correction is induced by the interaction and is proportional to chemical potential. This result agrees with the corresponding results obtained in the method which employs the Schwinger-Dyson equation for the fermion propagator in the dense Nambu-Jona-Lasinio model in the first order of perturbation theory in the coupling constant, where the interaction induced contribution to the axial current is associated with a relative shift in the longitudinal momenta in the dispersion relations of opposite chirality fermions.

Key Words: axial current, magnetic field, Nambu-Jona-Lasinio model

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Єжов С.М.

Нещодавно кіральну аномалію було використано і аргументовано [1], що недисипативний аксіальний струм в нормальному стані релятивістської матерії у зовнішньому магнітному полі в точності визначається струмом в теорії невзаємодіючих ферміонів. Однак кіральна аномалія містить дивергенцію аксіального і тому для того, щоб отримати з неї аксіальний струм необхідно так би мовити проінтегрувати кіральну аномалію. При цьому завжди залишається питання чи дорівнює константа інтегрування нулю чи ні.

В роботі [2] в моделі Намбу-Йона-Лазініо [3] вперше досліджувалось в методі рівнянь Швінгера-Дайсона для ферміонного пропагатора питання поправок до аксіального струму внаслідок ефектів взаємодії і було показано їх присутність. Однак модель Намбу-Йона-Лазініо є неперенормованою, а кіральна аномалія має місце в калібрувальних теоріях, які є перенормованими теоріями. Тому дуже важливо розглянути питання поправок до аксіального струму внаслідок ефектів взаємодії в теорії збурень в перенормованій теорії.

На жаль метод рівнянь Швінгера-Дайсона для ферміонного пропагатора, який був застосований в моделі Намбу-Йона-Лазініо [2] дуже непросто використати в калібрувальних теоріях і тому питання поправок до аксіального струму слід розглянути методом стандартної теорії збурень. Але спершу ми розглянемо поправку до аксіального струму в першому порядку теорії збурень в моделі Намбу-Йона-Лазініо і покажемо, що отриманий результат узгоджується з результатами роботи [2].

Лагранжіан моделі Намбу-Йона-Лазініо [3] має наступний вигляд

$$L = \bar{\psi}(iD_\nu + \mu\delta_{\nu 0})\gamma^\nu\psi + \frac{G_{int}}{2}[(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma^5\psi)^2], \qquad (1)$$

де μ є хімічний потенціал. Коваріантна похідна містить вектор-потенціал, який описує в

© Е.В. Горбар, 2014

калібровці Ландау постійне магнітне поле направлене по вісі z.

В роботі [1] було показано, що у вільній теорії в релятивістській ферміонній матерії існує наступний аксіальний струм

$$< j_5^3 >_0 = -\frac{eB\mu}{2\pi^2}\,. \qquad (2)$$

Цей внесок у нульовому порядку теорії збурень відомий як топологічний внесок.

Перша поправка до топологічного внеску (2) в моделі, що розглядається має наступний вигляд

$$< j_5^3 >_1 = \int \frac{d^4p}{i(2\pi)^4} tr[\,\gamma^3\gamma^5\bar{S}^{(1)}(p)\Sigma^{(0)}\bar{S}^{(0)}(p) + \gamma^3\gamma^5\bar{S}^{(0)}(p)\Sigma^{(0)}\bar{S}^{(1)}(p) + \gamma^3\gamma^5\bar{S}^{(0)}(p)\Sigma^{(1)}\bar{S}^{(0)}(p)]\,, \qquad (3)$$

де

$$\bar{S}^{(0)}(p) = i\frac{(p_0+\mu)\gamma^0 - \boldsymbol{p}\bullet\boldsymbol{\gamma}}{(p_0+\mu)^2 - \boldsymbol{p}^2},$$

$$\bar{S}^{(1)}(p) = -eB\frac{(p_0+\mu)\gamma^0 - p_3\gamma^3}{[(p_0+\mu)^2 - \boldsymbol{p}^2]^2}\gamma^1\gamma^2,$$

$$\Sigma^{(0)} = G_{int}\int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} tr\big[\bar{S}^{(0)}(k) - \gamma^5\bar{S}^{(0)}(k)\gamma^5\big],$$

$$\Sigma^{(1)} = G_{int}\int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} tr\big[\bar{S}^{(1)}(k) - \gamma^5\bar{S}^{(1)}(k)\gamma^5\big].$$

Обчислюючи слід по матрицях Дірака в рівнянні (3) ми знаходимо, залишаючи лише найбільш розбіжний внесок, наступну першу пертурбативну поправку

$$< j_5^3 >_1 = -\frac{G_{int}eB\mu\Lambda^2}{12\pi^2}, \qquad (4)$$

де Λ – ультрафіолетовий параметр обрізання по імпульсам. Якщо розкласти вираз для аксіального струму в роботі [2], то для першої поправки до аксіального струму знайдемо значення $-aeB\mu g/\pi^2$, де a є чисельна константа порядку одиниці, яка визначається схемою регулязації.

Таким чином, отримана нами перша пертурбативна поправка (4) до топологічного внеску (3) відмінна від нуля і чудово узгоджується із поправкою знайденою в методі рівнянь Швінгера-Дайсона. Це означає, що метод теорії збурень для обчислення аксіального струму може бути застосовано у перенормованих калібрувальних теоріях.

Список використаних джерел

1. *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.

2. *Gorbar E.V.* Chiral asymmetry of the Fermi surface in dense relativistic matter in a magnetic field / E.V. Gorbar, V.A. Miransky, and I.A. Shovkovy// Physical Review C. – 2009. – Vol.80. – P. 032801(R).

3. *Nambu Y.* Dynamical model of elementary particles based on an analogy with the theory of superconductivity. I / Y. Nambu and G. Jona-Lasinio // Physical Review. – 1961. – Vol. 122. – P. 345-358.

References

1. NEWMAN, G.M. and SON, D. (2006) Response of strongly-interacting matter to magnetic field: some exact results *Physical Review D.* 73. p. 045006.

2. GORBAR, E.V., MIRANSKY, V.A., and SHOVKOVY, I.A. (2009) Chiral asymmetry of the Fermi surface in dense relativistic matter in a magnetic field *Physical Review C.* 80. p. 032801(R).

3. NAMBU, Y. and JONA-LASINIO, G. (1961) Dynamical model of elementary particles based on an analogy with the theory of superconductivity. I Physical Review. 122. p. 345-358.

Надійшла до редколегії 29.05.14

УДК 539.199, 539.21

Забашта Ю.Ф.[1] д.ф.-м.н., проф.,
Орел В.Е.[2] д.б.н.
Вергун Л.Ю.[1] к.ф.-м.н., н.с.,
Загородня О.А.[1] к.ф.-м.н., м.н.с.,
Свечнікова О.С.[1] к.ф.-м.н., с.н.с.,

Метод дослідження властивостей колагеноподібних пептидів, що застосовуються в сучасних медичних технологіях

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,
e-mail: vergunliena@rambler.ru
[2]Національний інститут раку, 03022, м.Київ, вул.Ломоносова 33/43

Yu.F. Zabashta[1], Dr. Sci., Prof.,
V.E.Orel[2], Dr. Sci.
L.Yu. Vergun[1], PhD, Sci. Res.,
O. A. Zagorodnia[1], PhD, Sci. Res.,
O.S.Svechnikova[1], PhD, Sci. Res.

Method for the Study of Properties of Collagen-Type Peptides Used in Modern Medical Technology

[1]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: vergunliena@rambler.ru
[2] National Cancer Institute, Kyiv, Ukraine
03022,Kiev,Lomonosova street 33/43

Пропонується метод дослідження кінетики конформаційних перетворень в колагеноподібних структурах. В сучасній медицині зазначені структури використовуються для отримання інформації щодо характеру розповсюдження злоякісних пухлин та особливості їх морфологій при взаємодії з фармацевтичними препаратами.. Для отримання зазначеного параметру запропоновано експериментальну методику.

Ключові слова: кінетики переходу «клубок-спіраль», колагеноподібні структури, розсіяння світла

A method for study of nonlinear kinetics of coil-helix transition in collagen-type structures has been proposed. The method has been tested for one of such structures with molecules having 40 nm in length. The proposed physical method is based on the fact that as a result of coil-helix transition collagen-like particles change their shape On the basis of experimental data a time of shaping of triple helix has been estimated. Thus, the experimental method provides for the study of light scattering in liquid system «water + denatured collagen». The given method has been proposed to be used in selecting a length of CMP (*Collagen Mimetic Peptides) molecules used in the modern medical science.*

Key Words: kinetics of coil-helix transition, collagen-type structures, light –scattering

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Introduction

A lot of researches have dealt with mechanisms of coil-helix transition in collagen-type structures [see, for example 1, 2]. However, as it has been stated in research [3], many kinetic and theoretical problems of coil-helix transition have still been unsolved [4,5]

It is known [6] that collagen is the main structural albumen of the connective tissue that ensures stability of its skeleton. In addition, collagen is one of the most biologically stable and compatible natural polymers used for the development of synthetic biological materials and theraupetic methods [7]. Physical methods are of paramount importance for determining a structure of bio-molecules [8]. This research deals with experimental method to investigate nonlinear kinetics of helix-coil transition in collagen-like structures and possible ways of its application in the modern medical science.

Method

The proposed physical method is based on the fact that as a result of coil-helix transition collagen-like particles change their shape [9]. In connection therewith, two well-known approaches have been used: selection of a model system, the aqueous solution of denatured collagen [10] and application of molecular light scattering method in the course of experiment [3].

Thus, the experimental method provides for the study of light scattering in liquid system «water + denatured collagen». The collagen concentration has been (0.05; 0.1; and 0.2) g/l. Light scattering has been measured at a scattering angle of 45º. The use of this method is caused as follows:

Aqueous solution of denatured collagen (gelatin) is known to be a disperse system at a temperature of 70^0C, with separate peptide chains playing a role of the disperse particles. As temperature decreases, at a concentration of dissolved matter less than 0.4 g/l, these disperse particles are shaping into individual aggregates. These aggregates have triple-helix collagen-like structure [11]**.** Shaping of these aggregates is caused by changes in conformations of peptide chains, as a result of coil-helix transition

According to the classic theory of molecular light scattering [12] such structural transformations lead to an increase in intensity of light scattering by disperse medium. The study has been carried out with the use

© Ю.Ф.Забашта, В.Е.Орел, Л.Ю.Вергун, О.А.Загородня, О.С.Свечнікова 2014

of installation described in [13]. The scheme is given on Figure.1, where 1 is a lamp; 2, 11 are light filters; 3 is a glass plate dividing light into two beams; 4 is a cuvet with solution of investigated substance; 5 is a light trap; 6 is a glass diffuser; 7, 7', 9, 9' are lenses; 8, 8' are compensating septa; 10, 10' are rhombic prisms; and 12 is an ocular.

The experimental curves are showed on Figure 2, where ξ is a ratio of scattering intensity at any time $I(t)$ to intensity of scattering at the initial time I_0. The initial time is considered be a time of preparation of the solution.

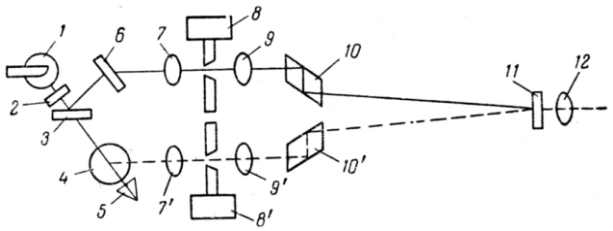


Fig.1. Experimental installation

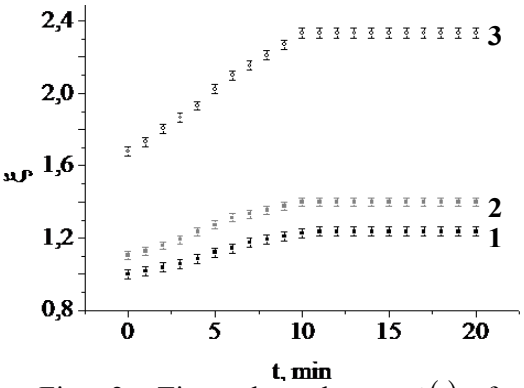


Fig. 2. Time dependence $\xi(t)$ for gelatin solution: concentration 0.05 g/l (1); 0.1 g/l (2); and 0.2 g/l (3).

It is known [14] that at temperature 40ºC liquid system «denatured collagen + water» is transformed into gel with chains shaping a grid. It is also known that before this transition there is a stage when the coils are reshaping into helices. In order to process the experimental data the classic theory of light scattering in solutions has been used. According to this theory light scattering I is defined by the formula:

$$I = HcMP(\theta), \tag{1}$$

Where c is concentration of solved substance; M is its molecular mass; H is a constant for this system of substance and solvent; $P(\theta)$ is some function of scattering angle depending on properties of scattering particles. General view of this function is as follows:

$$P(\theta) = \frac{1}{2} P_{\upsilon}(\theta)\left(1 + \cos^2\theta\right), \tag{2}$$

Where $P_{\upsilon}(\theta)$ for coil is defined as

$$P^K(\theta) = \frac{2}{x^2}\left(e^{-x} + x - 1\right), \tag{3}$$

And that for helix is

$$P^P(\theta) = \frac{1}{y} Si(2y) - \left(\frac{\sin y}{y}\right)^2. \tag{4}$$

In the above formulas:

$$x = 16\pi^2 \frac{R^2}{\lambda^2} \sin^2\frac{\theta}{2}, \tag{5}$$

$$y = \frac{2\pi L}{\lambda} \sin\frac{\theta}{2}, \tag{6}$$

$$Si(2y) = \int_0^{2y} \frac{\sin t}{t} dt, \tag{7}$$

where R^2 is gyration radius of a coil; L is a helix length; λ is a length of light wave. At the initial time all chains are shaped as coils. In this case intensity of light scattering is determined as:

$$I_0 = HcMP^K(\theta). \tag{8}$$

Later, a portion of coils are reshaping into helices. If c^K and c^P are concentrations of coils and helices, respectively, intensity of light scattering may be expressed as follows:

$$I(t) = Hc^K(t)MP^K(\theta) + Hc^P(t)MP^P(\theta). \tag{9}$$

Having divided formula (9) by formula (8) we obtain:

$$\xi = 1 + \frac{c^P(t)}{c}\left(\frac{P^P(\theta)}{P^K(\theta)} - 1\right). \tag{10}$$

Length of light wave in our experiment was equal to 417 nm, length of denatured collagen was ~ 300 nm. Value of function $P_P(\theta)$ for these figures is equal to 0.74. At $t \to \infty$ concentration of helices approaches c: $c^P(t) \to c$. According to the formula (10):

$$\xi \to \frac{P^P(\theta)}{P^K(\theta)} = a. \tag{11}$$

Condition (11) allows us to calculate $P^K(\theta)$ with the help of experimentally measured asymptotic values of ξ.

Finally, we obtain formula for concentration of helices:

$$c^P = c\left(\frac{\xi - 1}{a - 1}\right). \tag{12}$$

Experiment results and discussion

Figure 3 shows the obtained dependences $c^P(t)$ for concentrations 0.05; 0.1; and 0.2 g/l.The curves allow

us to estimate time of coil – helix transition. According to Fig. 3 for the investigated collagen-like peptides having 40 nm in length this time is about 10 minutes.

The proposed method can be used for the study of mechanisms of interaction of CMP (Collagen Mimetic Peptides) synthetic molecule with collagen matrix. According to [15] CMP synthetic molecule that has a structure similar to the collagen structure is a link between the collagen matrix and an embed nano-particle that allows us to determine a status of connective tissue. Also, pursuant to [15] a process of tying CMP with collagen framework consists of several stages. Firstly, a synthetic molecule with captured nano-particle is brought to the investigated part of the organism. Then, it ties with collagen matrix of «CMP + nano-particle» complex due to imbedding the latter into triple-helix structure of albumen molecule. At the last stage, stay of visualizing nano-particles in the investigated part of the organism comes to an end, as a result of change in the structure of CPM molecule when temperature reaches 37ºC. A pattern of imbedding of CMP molecules in collagen fibers is showed on Figure 4.

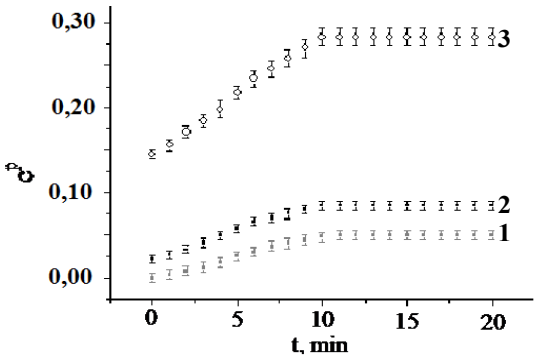


Fig.3. Time dependence $c^P(t)$ for gelatin solution: concentration 0.05 g/l (1); 0.1 g/l (2); and 0.2 g/l (3).

According to [15] it has been established that a change in CMP length influences time of its tie with collagen. As showed in [15] short and long CMP molecules may be used for quick and long investigation, respectively. According to [16], when the triple-helix structure destroys separate peptide chains should arise. It is known that for collagen-like synthetic molecules (for instance, gelatin molecules) destruction of over-molecular structures

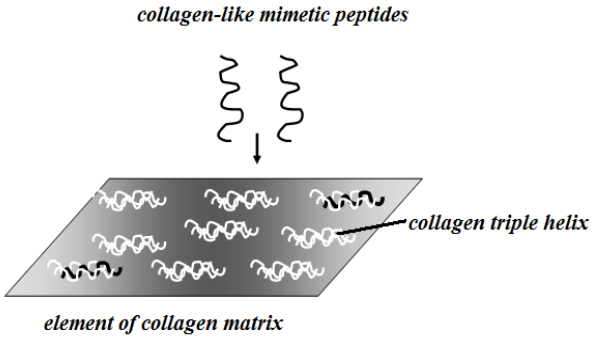


Fig. 4. CMP molecules penetration into collagen matrix

almost coincide with the start of their spatial aggregation [17]. The proposed method is based on this fact. Using the Figures a time of assembly of triple helix may be determined depending on concentration. Proceeding from Figure 3 this time is equal to 10 minutes. Let's assume that time of destruction of triple helix is equal to time of assembly of single helices. Actually, the measured time is a time during which the triple helix exists. As mentioned above, CMP molecules are embedded into triple helix. Consequently, time of existence of triple helix is time when CMP molecule is tied with collagen matrix.

Conclusions

The properties of 40 nm-long synthetic collagen-like molecules structured similar to CMP molecules have been studied with the help of the optic method. Time of assembly of triple helix has been estimated on the basis of the experimental data.

This method is proposed to be used for selecting lengths of CMP molecules. As described above, one of the important parameters influencing effectiveness of the use of CMP molecules in the modern medical science is time when these molecules are tied with collagen matrix. It has been noted also that this time depends on length of CMP molecule. In this study, a method based on measuring intensity of light scattering has been applied to estimate the above time. The method has been tested for collagen-like molecules of 40 nm. The bonding time has been estimated as 10 minutes. This method may be useful for selecting optimal length of CMP molecules when designing nanomedicines.

Список використаних джерел

1. *Bachmann A.* Collagen triple-helix formation in all-trans chains proceeds by a nucleation growth mechanism with a purely entropic barrier/ A. Bachmann, T. Kiefhaber, S. Boudko at al. // PNAS. – 2005. – 102 (39). – P.13897–13902.

2. *Takaki Koide.* Self-complementary peptides for the formation of collagen-like triple helical supramolecules / Takaki Koide, Daisuke L. Homma, Shinichi Asada, Kouki Kitagawa // Bioorganic & medicinal chemistry letters. – 2005. – Vol. 15. – P. 5230–5233.

3. *Lübke K.* Chemie und Biochemie der Aminosäuren, Peptide und Proteine, Bd. I u. II/ K. Lübke, E. Schröder, G. Kloss.- Stuttgart: Georg Thieme Verlag, 1975.- 332p.

4. *Baumgärtner A.* Dynamics of the helix-coil transition in biopolymers/ A. Baumgärtner K.Binder // J.Chem.Phys.-1979.-70(1).-P. 429-437.

5. *Angel C.A.* The old problems of glass and the glass transition, and the many new twist/ C.A. Angel // Proc.Natl.Acad.Sci.USA. -1995.- №92.- P.6675-6682.
6. *Ryan J. Love.* Transient inhibition of connective tissue infiltration and collagen deposition into porous poly(lactic-*co*-glycolic acid) discs/ J. Love Ryan, Kim S. Jones // Journal of Biomedical Materials Research Part A.-2013.-101 (12).-P. 3599–3606.
7. *Yang C.* Application of recombinant human collagen in tissue engineering/ *C. Yang , P.Hillas at al.*// BioDrugs. – 2004. – №.18. – P. 103–119.
8. *Morikis Dimitros.* Physical methods for structure, dynamic and binding in immunological research/ Dimitros Morikis John D.Lambris//Trends in Immunology.-2004.- 25(12).-P.700-707.
9. *Morton D. Maser.* Soluble Earthworm Cuticle Collagen: A Possible Dimer of Tropocollagen/ Maser Morton D, Rice Robert V// The Journal of Cell Biology.- 1963.-№18.- P.569-576.
10. *Watanabe Kazuo.* Configuration between Re-Formed Collagen Triple Helices and Artificially Introduced Cross-Links in Gelatin Gels/ Kazuo Watanabe , Yoshihiko Tezuka, Tadahiro Ishii // Macromolecules. - 1997. - *30* (25).- P. 7910–7913.
11. *Finer E. G.* Gel formation from solutions of single-chain gelatin/ E. G. Finer, F. Franks, M. Phillips, A. Suggett // Biopolymers. - 1975.- 14 (10).- P.1995 – 2005.
12. *Fabelinski. I.L.* Molecular Scattering of Light / I.L.Fabelinski.– New York: Plenum Press, 1968.-622p.
13. *Johnson Richard W.*. Daytime Visibility and Nephelometer Measurements Related to its Determination/ Richard W Johnson //Atmospheric Enviroment.-1981.-15(10/11).-P.1835-1845.
14. *Bigi A.* Relationship between triple-helix content and mechanical properties of gelatin films/A.Bigi, S. Panzavolta, K. Rubini // Biomaterials. – 2004. – №25. – P. 5675–5680.
15. *Wang Allen Y.* Spatio-Temporal Modification of Collagen Scaffolds Mediated by Triple Helical Propensity*,* Allen Y. Wang, Catherine A. Foss, Shirley Leong, Xiao Mo, Martin G. Pomper, M. Yu. Seungju // Biomacromolecules.- 2008. - *9* (7).- P. 1755–1763.
16. *Leninger A.* Principles of Biochemistry/ A.Leninger, D. Nelson, M. Cox.- W. H. Freeman, Hardback, Fifth edition, 2008.- 1158p.
17. *Kozlov P.V.* The structure and properties of solid gelatin and the principles of their modification/ P.V. Kozlov, G.I. Burdygina // Polymer. - 1983.- № 24.-P. 651–666.

References

1. BACHMANN, A. & KIEFHABER, T. & BOUDKO, S. (2005) Collagen triple-helix formation in all-trans chains proceeds by a nucleation growth mechanism with a purely entropic barrier. *PNAS.* 102 (39). p.13897–13902.
2. KOIDE, T. & L.HOMMA, D. & ASADA, S. & KITAGAVA, K. (2005) Self-complementary peptides for the formation of collagen-like triple helical supramolecules. *Bioorganic & medicinal chemistry letters*. 15. p. 5230–5233.
3. LÜBKE, K., SCHRÖDER, E., and KLOSS, G. (1975) *Chemie und Biochemie der Aminosäuren, Peptide und Proteine, Bd. I u. II*, Georg Thieme Verlag, Stuttgart.
4. BAUMGÄRTHER, A. & BINDER, K. (1979) Dynamics of the helix-coil transition in biopolymers.*J.Chem.Phys*. 70(1). p. 429-437.
5. ANGEL, C. (1995) The old problems of glass and the glass transition, and the many new twist. *Proc.Natl.Acad.Sci.USA.* 92. p.6675-6682.
6. LOVE, R.J. & JONES, K.S. (2013) Transient inhibition of connective tissue infiltration and collagen deposition into porous poly(lactic-*co*-glycolic acid) discs. *Journal of Biomedical Materials Research Part A.* 101 (12). p. 3599–3606.
7.YANG, C. & HILLAS, P.(2004) Application of recombinant human collagen in tissue engineering. BioDrugs. 18. p. 103–119.
8. MORKIS, D. & LAMBRIS, J.D. (2004) Physical methods for structure, dynamic and binding in immunological research. *Trends in Immunology*. 25(12). p.700-707.
9. MASER, M.D. & RICE, R.V.(1963) Soluble Earthworm Cuticle Collagen: A Possible Dimer of Tropocollagen. *The Journal of Cell Biology*. 18. p.569-576.
10. WATANDE, K. & TEZUKA, Y. & ISHII, T. (1997) Configuration between Re-Formed Collagen Triple Helices and Artificially Introduced Cross-Links in Gelatin Gels. *Macromolecules*. *30* (25). p.7910–7913.
11.FINER,E.G. & FRANKS, F. & PHILLIPS, M.C.& SUGGETT, A. (1975) Gel formation from solutions of single-chain gelatin. *Biopolymers*. 14 (10). p.1995 – 2005.
12. FABELINSKI, I.L. (1968) *Molecular Scattering of Light*. New York: Plenum Press.
13. JONSON, R.W. (1981) Daytime Visibility and Nephelometer Measurements Related to its Determination. *Atmospheric Enviroment*.- 15(10/11). p.1835-1845.
14. BIGI, A. PANZAVOLTA, & S. RUBINI, K. (2004) Relationship between triple-helix content and mechanical properties of gelatin films. *Biomaterials*. № 25. p. 5675–5680.
15. WANG, A.Y. & FOSS, C.A. & LEONG, S. M. (2008) Spatio-Temporal Modification of Collagen Scaffolds Mediated by Triple Helical Propensity. *Biomacromolecules*. 9 (7). p. 1755–1763.
16. LENINGER, A., NELSON, D. and COX, M. (2008) Principles of Biochemistry: W. H. Freeman, Hardback, Fifth edition..
17. KOZLOV, P.V. & BURDYGINA, G.I.(1983) The structure and properties of solid gelatin and the principles of their modification. *Polymer*. 24. p. 651–666.

Надійшла до редколегії 28.08.14

УДК 535.215.4; 535.34; 535.37

Кондратенко С. В., д.ф.-м.н., доц.

Вплив флуктуацій розмірів складу на люмінесцентні властивості ансамблю нанооб'єктів InGaAs

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13
e-mail: kondr@univ.kiev.ua

S. V. Kondratenko, Dr. Sci., Ass.Prof.

Effect of size and composition fluctuations on the luminescent properties of ensemble of InGaAs nanoobjects

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: kondr@univ.kiev.ua

У даній роботі досліджено люмінесцентні властивості гетероструктур InGaAs/GaAs з нанорозмірними об'єктами InGaAs. Досліджено форму спектрів фотолюмінесценції в діапазоні температур 10-290 К. Розраховано електронний спектр гетеросистем та енергій міжзонних переходів для нанооб'єктів InGaAs різного розміру та компонентного складу. Показано, що форма спектрів фотолюмінесценції визначається гаусовим розподілом енергій зонного-зонного переходу за участю основних станів зони провідності та валентної зони. Фізичною причину спостережуваного розкиду енергій є дисперсія розмірів, неоднорідності компонентного складу та деформацій в ансамблі нанооб'єктів InGaAs.

Ключові слова: фотолюмінесценція, гетероструктури, квантово-розмірні ефекти.

The luminescent properties of heterostructures InGaAs/GaAs with InGaAs nanoscale objects were investigated. Multilayer heterostructures were grown using molecular beam epitaxy technique. The shape of the photoluminescence spectra were studied in the temperature range from 10 K to 290 K. The electronic spectrum of heterosystems as well as the energy of interband transitions for InGaAs nano-objects were calculated for different sizes and InGaAs component composition. It is shown that the shape of the photoluminescence spectra is determined by the Gaussian distribution of the energy of band-to-band optical transitions between the ground states of the conduction band and valence band of nanoscale objects. The physical reason for the observed energy dispertion is the variation of sizes, heterogeneity of component composition and strain relief in the ensemble of nano-objects InGaAs. Non-monotonic temperature dependence of the width of the photoluminescence spectra indicates the existence of temperature-dependent redistribution of photoexcited charge carriers between neighbouring nanoislands having different energy of the ground states.

Key Words: photoluminescence, heterostructures, quantum-size effects

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Вступ

Гетероструктури з самоорганізованими квантовими точками та квантовими нитками є привабливими об'єктами з точки зору фундаментальної фізики та їхнього практичного застосування в оптоелектроніці. Електронна структура та оптичні властивості таких систем головним чином визначаються формою та розміром КТ, композиційним профілем, розподілом механічних напружень тощо [1]. Квантові точки та квантові нитки InGaAs останнім часом є об'єктом інтенсивних досліджень. Значна кількість публікацій була присвячена вивченню оптичних та фотоелектричних властивостей InGaAs КТ, зокрема спектрів поглинання [2], фотопровідності [3] та фотолюмінесценції [4]. Було показано, що оптичні та електричні властивості цих наногетероструктур визначаються морфологією, компонентним складом та просторовим розподілом деформацій. Результати досліджень квантово-розмірних гетероструктур виявили перспективи щодо їх застосування як активних елементів нових сонячних елементів, фотодетекторів та транзисторів. На сьогодні, розроблено фотодетектори з InGaAs квантовими точками, які фоточутливі в середньому (3-5 мкм) та

© С. В. Кондратенко, 2014

дальньому (8-14 мкм) інфрачервоному діапазоні, в основу роботи яких покладено електронні переходи за участю квантово-розмірних станів. Квантові точки InAs в матриці GaAs використані як активне середовище інфрачервоних лазерів [7].

Невідповідність сталих ґраток наноострівців $In_xGa_{1-x}As$ та її GaAs оточення (~ 7*x* %) зумовлюють виникнення суттєвих механічних напружень в околі InGaAs, які в свою чергу призводять до утворення інтерфейсних пасток [6, 7]. Ансамблю самоорганізованих КТ властива також неоднорідність їх компонентного складу, зокрема величина дещо відрізняється як в межах нанооб'єкту, так і для сусідніх нанокластерів. Зазначені неоднорідності можуть мати істотний вплив на електричні та оптичні властивості систем з КТ і, отже, на роботу електронних та оптоелектронних пристроїв на їх основі.

У даній роботі представлено результати досліджень електронного спектру та оптичних властивостей гетероструктур $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ з нанорозмірними об'єктами $In_xGa_{1-x}As$. Наведені дослідження спрямовані на вивчення повного електронного спектра гетеросистем, зокрема на з'ясування впливу варіацій розмірів та компонентного складу нанооб'єктів на форму спектрів фотолюмінесценції та температурні залежності інтегральної фотолюмінесценції.

Експеримент

Досліджувані багатошарові $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ гетероструктури вирощені методом молекулярно-променевої епітаксії на напівізольованій підкладці GaAs з кристалічною орієнтацією поверхні зрізу (001). Після видалення з її поверхні окисного шару (температура підкладки $T \approx 650$ ºC) вирощувався буферний шар GaAs товщиною 0.5 μm ($T \approx 600$ ºC, швидкість росту складала 1 моношар (МШ) в секунду, (1.0 МШ/с)). Після чого температура підкладки знижувалася до 540 ºC і вирощувалися N шарів $In_xGa_{1-x}As$, розділених проміжними шарами GaAs (001) товщиною 60 МШ. Номінальна концентрація індію в багатошаровій структурі $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ (001) варіювалась від $x = 0.3$ до $x = 0.6$. Швидкість росту GaAs та $In_xGa_{1-x}As$ складала 0.4 та 0.8 МШ/с відповідно. Ріст структур відбувався при постійному тиску парів As, рівному 10^{-5} Торр. Перехід від псевдоморфної двовимірної (2D) моди росту до утворення тривимірних (3D) наноострівців контролювався за дифракцією швидких електронів. Перехід 2D→3D для першого шару $In_xGa_{1-x}As$ реалізувався при досягненні товщини d = 4.0 МШ $In_xGa_{1-x}As$. Дослідження топології поверхні непокритих нанорозмірних об'єктів $In_xGa_{1-x}As$ (без верхнього захисного GaAs шару) проводились методом атомно-силової мікроскопії (АСМ) в напівконтактному режимі (рис.1). З аналізу АСМ зображень визначено середній розмір та поверхневу густину InGaAs наноострівців досліджуваних гетероструктур. Виявилось, що середня висота та діаметр основи складали 5.0±0.5 нм та 50±10 нм, відповідно. Поверхнева густина нанооб'єктів становила ~10^{10} см$^{-2}$.

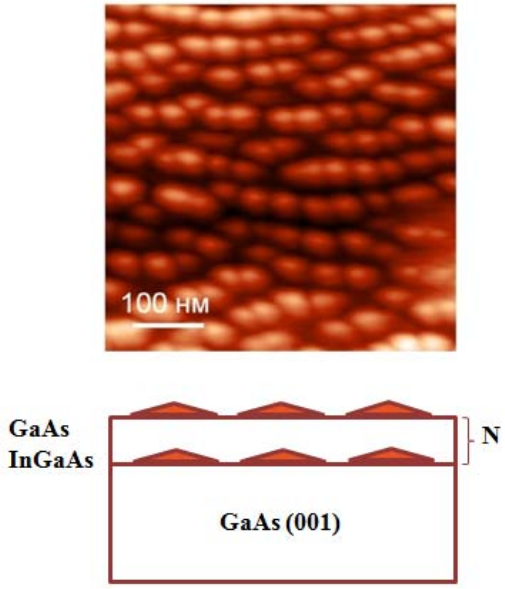


Рис. 1. 500x500 нм^2 АСМ зображення поверхні гетероструктури Sb195 з InGaAs КТ та схема багатошарової структури.

Вимірювання спектрів фотолюмінісценції (ФЛ) проводились за стандартною методикою на інфрачервоному спектрометрі в діапазоні енергій $h\nu$ від 1.0 еВ до 1.4 еВ при збудженні лазером з довжиною хвилі 404 нм та густиною потужності 5 Вт/см^2. Спектральна ширина щілини у даному діапазоні вимірювань становила 17 меВ. Температура зразка складала варіювалась від 10 К до 290 К, як детектор використовувався охолоджуваний Ge фотоприймач.

Результати та їх обговорення

Гетероструктури InGaAs/GaAs відносять до I-го типу, в яких обмеження існує як для руху дірок у валентній зоні InGaAs, так і для електронів у зоні провідності InGaAs. В

залежності від розмірів $In_xGa_{1-x}As$ квантово-розмірних об'єктів, вмісту x індію та величин механічних напружень у них змінюється кількість та положення енергетичних рівнів. Оскільки висота нанооствівців набагато менша за їх поздовжні розміри, що складають кілька десятків нанометрів, то для опису електронного спектра нанооствівців $In_xGa_{1-x}As$ в GaAs оточенні достатньо було скористатись квантово-механічною моделлю одновимірної потенціальної ями скінченої глибини. Тобто, вплив обмеження руху носіїв заряду вздовж епітаксіальних шарів на електронний спектр нанооствівців $In_xGa_{1-x}As$ не враховувався.

Розрахунок електронних спектрів та енергій зона-зонних переходів в $In_xGa_{1-x}As$ нанооствівцях проведено за допомогою програми Nextnano. На рис.2 наведена ширина забороненої зони в залежності від вмісту In для двовимірної квантової ями $In_xGa_{1-x}As$ товщиною 3 нм та об'ємного напруженого твердого розчину InGaAs в оточенні GaAs. Виявилось, що зростання ширини забороненої зони InGaAs внаслідок квантування руху електронів та дірок є більшим для нанорозмірних об'єктів InGaAs із більшим вмістом In (більш глибокими потенціальними ямами).

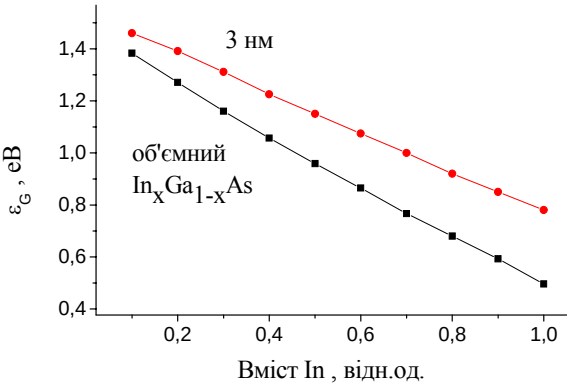


Рис. 2. Ширина забороненої зони в залежності від вмісту In для двовимірної квантової ями $In_xGa_{1-x}As$ товщиною 3 нм та об'ємного напруженого твердого розчину $In_xGa_{1-x}As$ в GaAs оточенні.

Енергетична зонна діаграма наногетероструктури InGaAs/GaAs з позначеним стрілкою дозволеним в них міжзонним переходом за участю основних станів наведено на рис.4,б. В квантово-розмірних гетероструктурах основний внесок у поглинання світла та фотолюмінесценцію дають міжзонні переходи між локалізованими станами зони провідності та валентної зони з однаковим квантовим числом n.

Розраховані енергетичні відстані між квантово-розмірними станами із $n = 1$ зони провідності та валентної зони $In_xGa_{1-x}As$ КЯ із різною товщиною і вмістом In наведено на рис. 3. Як випливає із розрахунків при розмірах $d > 20$ нм ефектами розмірного квантування на енергетичний спектр досліджуваних структур можна знехтувати, оскільки енергетична відстань між підзонами розмірного квантування виявляється $\sim kT$. Як випливає із наведених розрахунків, дисперсія висот ансамблю нанооствівців суттєво впливає на розкид енергій спостережуваних в гетеросистемі зона-зонних переходів.

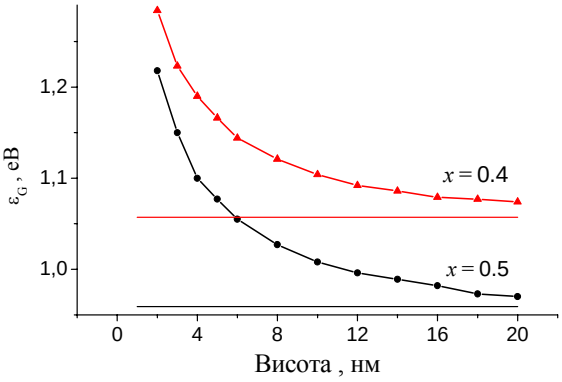


Рис. 3. Розраховані енергетичні відстані між квантово-розмірними станами із $n = 1$ зони провідності та валентної зони $In_xGa_{1-x}As$ КЯ із різною товщиною і вмістом In. Вертикальні лінії відповідають величині для відповідного об'ємного матеріалу.

На рис. 4 наведено спектральні залежності ФЛ гетероструктур InGaAs/GaAs з нанооствівцями $In_xGa_{1-x}As$ із різним вмістом In: x = 0.3 (зразок №1), x = 0.4 (зразок №2) та x = 0.5 (зразок №3), виміряні при температурі T = 80 К.

За невеликих інтенсивностей збудження (~ 100 мВт/см^2 основний внесок у смугу ФЛ давали переходи за участю основних станів нанооствівців $In_xGa_{1-x}As$ (рис.4,а). Як відомо, для спостереження переходів за участю збуджених станів з $n > 1$ інтенсивність збудження має перевищувати 50 Вт/см^2 [8]. Форма спостережуваних смуг ФЛ гетероструктур із різним вмістом In в нанооствівцях обумовлена дисперсією розмірів InGaAs нанооствівців. Виявилось, що в гетероструктурах із меншим середнім розміром нанооствівців та більшим вмістом In спостерігалась більш широка смуга ФЛ, зумовлена розкидом енергій

випромінювального переходу між основними квантово-розмірними станами зони провідності та валентної зони $E_{e1} \rightarrow E_{hh1}$. Це добре узгоджується із результатами розрахунків, наведених на рис. 2 та рис. 3.

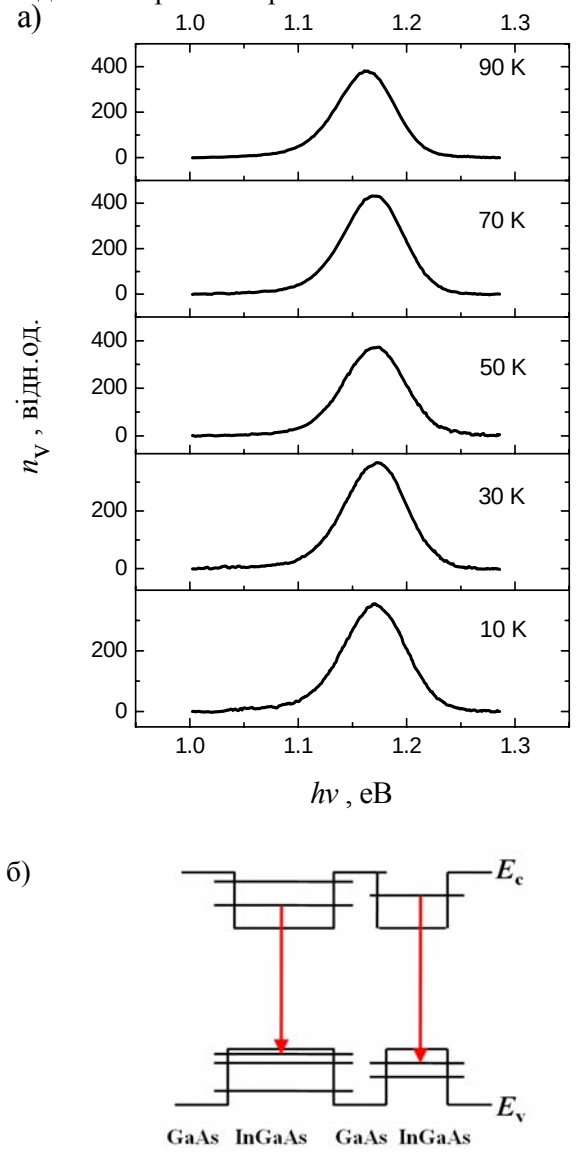


Рис. 4. а) Спектральні залежності ФЛ гетероструктур InGaAs/GaAs з нановстрівцями $In_xGa_{1-x}As$ при різних температурах. б) Енергетична діаграма гетероструктри InGaAs/GaAs з різними розмірами нановстрівців InGaAs.

Іншими причинами уширення смуги ФЛ є флуктуації компонентного складу всередині $In_xGa_{1-x}As$ нановстрівців, які можуть бути мінімізовані вибором оптимальних умов епітаксіального росту та просторовий розподіл механічних напружень.

Форма спектра ФЛ досліджуваних наногетероструктур InGaAs/GaAs описується кривою Гауса наступного вигляду:

$$f(h\nu) = A \cdot \exp\left(-\frac{4\ln 2(h\nu - h\nu_{max})^2}{\Delta_{1/2}^2}\right), \qquad (1)$$

де A – константа, $h\nu_{max}$ – енергетичне положення максимума спектра ФЛ, $\Delta_{1/2}$ – ширина смуги ФЛ на половині висоти.

Як показано вище, нерівноважні електрон-діркові пари, які виникають в GaAs під дією лазерного збудження, термалізуються і ефективно захоплюються основними квантово-розмірними станами нановстрівців InGaAs, після чого відбувається їх випромінювальна рекомбінація. Важливим питанням є механізм перерозподілу фотогенерованих носіїв заряду в ансамблі нановстрівців InGaAs із варіаціями компонентного вмісту, розмірів та величин механічних напружень. В зв'язку з цим, актуальним є з'ясування впливу дисперсії значень енергій переходу між квантово-розмірними станами зони провідності та валентної зони в ансамблі нановстрівців InGaAs на температурні залежності ФЛ наногетероструктур InGaAs/GaAs.

Спостережувана температурна залежність ширини смуги ФЛ ($\Delta_{1/2}$) виявилась немонотонною (рис. 5), що може бути наслідком розкиду ширини забороненої зони в ансамблі нановстрівців InGaAs. При зниженні температури від 170 К до 110 К спостерігалось звуження смуги. Проте, в діапазоні температур від 10 до 120 К мало місце, навпаки, збільшення ширини смуги при охолодженні. Подібне зростання ширини смуги спостерігалось при вимірюванні ФЛ в ансамблі нановстрівців із суттєвою дисперсією розмірів [9].

Одним із пояснень вищезгаданої особливості є існування обміну носіями заряду між нановстрівцями з різною шириною забороненої зони, ефективність якого залежить від температури. Після термалізації нерівноважні електрони та дірки за час ~ 1 нс [10] заповнюють випадковим чином основні стани всіх наявних нановстрівців. Як наслідок, за відсутності обміну носіями між нановстрівцями, при низьких температурах, внесок у смугу ФЛ дадуть нановстрівці всіх типів – ширина смуги в такому випадку буде максимальною. При збільшенні температури зростає ймовірність обміну носіями заряду між сусідніми нановстрівцями. При цьому, існує тенденція переважного заповнення квантово-розмірних станів з меншою енергією,

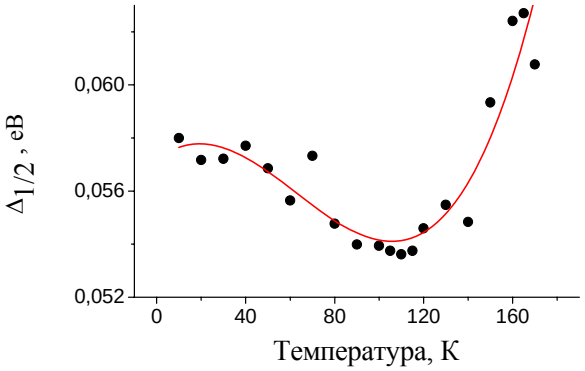


Рис. 5. Залежність ширини смуги ФЛ від температури.

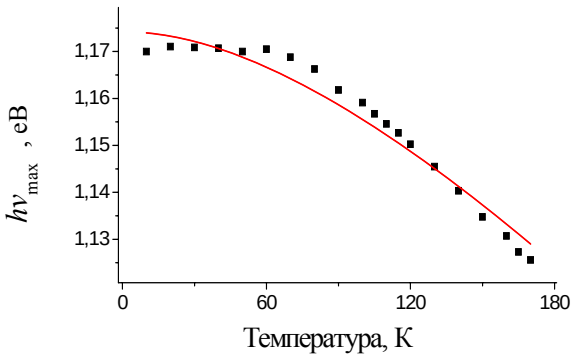


Рис. 6. Залежність положення максимуму смуги ФЛ від температури (точки) та результат апроксимації формулою Варшні.

що буде сприяти внеску в ФЛ від наноострівців більшого розміру і, відповідно, звуженню смуги ФЛ при збільшенні температури від 10 К до 110 К.

Існування мінімуму на температурній залежності $\Delta_{1/2}(T)$ поблизу 110 К вказує на існування додаткового механізму, який відповідає за збільшення ширини смуги при нагріванні. Його вплив особливо помітний в температурному діапазоні 110-170 К, коли має місце ефективна теплова емісія електронів та дірок з квантово-розмірних станів наноострівців. Зростання $\Delta_{1/2}(T)$ в цьому діапазоні зумовлено існуванням додаткових каналів рекомбінації за участю станів інтерфейсу, який обмежує ефективність перерозподілу нерівноважних носіїв в ансамблі наноострівців перед їх рекомбінацією. В результаті, при високих температурах носії рекомбінують безвипромінювально, а ймовірність їх повторного захвату є малою. Слід відзначити, що в температурному діапазоні 110-170 К спостерігалось суттєве зниження інтегральної ФЛ.

Іншою особливістю люмінесцентних властивостей, яка пов'язана з випромінюванням ансамблю наноострівців з різною шириною забороненої зони, є нелінійна залежність положення максимуму смуги ФЛ від температури, відмінна від поведінки об'ємного InGaAs (рис. 6). Так, при зменшенні температури від 170К до 80 К спостерігається зміщення максимуму смуги ФЛ ~ 0.48 меВ/К у короткохвильову область спектра. При температурах, нижчих за 80 К, максимум зміщувався менш швидко, а при $T < 70$ К його положення практично не залежало від температури.

Як відомо, температурна залежність ширини забороненої зони переважної більшості напівпровідників описується формулою Варшні:

$$\varepsilon_g(T) = \varepsilon_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T+\beta}, \qquad (2)$$

де α та β - емпірично підібрані коефіцієнти, які називають параметрами Варшні. На рис. 6 наведений результат апроксимації експериментальних даних залежністю (2) із параметрами $\varepsilon_g(0) = 1.174 \pm 0.001$ еВ, $\alpha = 6.7 \cdot 10^{-4} \pm 0.5 \cdot 10^{-4}$ еВ/К та $\beta = 260 \pm 10$ К. Суттєві відхилення спостерігаються в області низьких температур, де ширина смуги зростає при охолодженні, а обмін носіями між наноострівцями різного розміру практично відсутній.

Висновки

Показано, що форма спектрів фотолюмінесенції та низькоенергетичного краю спектрів фотопровідності наногетероструктур $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ визначається гауссовим розподілом енергій міжзонних переходів за участю квантово-розмірних станів, що зумовлений дисперсією розмірів, неоднорідностями компонентного складу та деформацій в ансамблі наноострівців $In_xGa_{1-x}As$.

Немонотонна залежність ширини спектрів фотолюмінесценції вказує на існування температурно-залежного перерозподілу нерівноважних носіїв заряду між наноострівцями з різною енергією основного стану.

Список використаних джерел

1. *Xie Qianghua*. Vertically Self-Organized InAs Quantum Box Islands on GaAs(100) / Qianghua Xie, A. Madhukar, Ping Chen, N.P. Kobayashi // Phys. Rev. Lett. – 1995. – Vol. 75. – № 13. – P. 2542-2545.

2. *Wolpert C*. Transient absorption spectroscopy of a single lateral InGaAs quantum dot molecule / C. Wolpert, L. Wang, A. Rastelli [et al.] // Phys. Stat. Sol. (b). –2012. – Vol. 249. – № 4. – P. 731-736.

3. *Moldavskaya L.D*. Infrared lateral photoconductivity of InGaAs quantum dot heterostructures grown by MOCVD / L.D. Moldavskaya, V.I. Shashkin, M.N. Drozdov [et al.] // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. –2003. – Vol. 17. – P. 634-635.

4. *Nedzinskas R*. Photoreflectance and photoluminescence studies of epitaxial InGaAs quantum rods grown with As_2 and As_4 sources / R. Nedzinskas, B. Čechavičius, V. Karpus [et al.] // J. Appl. Phys. –2011. – Vol. 109. – № 12. – P. 123526-123531.

5. *Bimberg D*. Quantum dot heterostructures / D. Bimberg, M. Grundmann, N. Ledentsov. – New York: Wiley, 1999.-325 p.

6. *Heitz R*. Observation of Reentrant 2D to 3D Morphology Transition in Highly Strained Epitaxy: InAs on GaAs / R. Heitz, T.R. Ramachandran, A. Kalburge [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 1997. – Vol. 78. – № 21. – P. 4071-4074.

7. *Kondratenko S.V*. Photoconductivity peculiarities in InGaAs quantum wire heterostructures: anisotropy and high photoresponsivity at room temperature / S.V. Kondratenko, O.V. Vakulenko, Vas.P. Kunets, Yu.I. Mazur [et al.] // Semicond. Sci. Technol. – 2012. – Vol. 27. – № 10. – P. 105024.

8. *Mazur Yu.I*. Cooperative Effects in the Photoluminescence of (In,Ga)As/GaAs Quantum Dot Chain Structures / Yu.I. Mazur, V.G. Dorogan, E. Marega // Nanoscale Research Letters. – 2010. – Vol. 5. – P. 991-1001.

9. *Polimeni A*. Temperature dependence of the optical properties of $InAs/Al_yGa_{1-y}As$ self-organized quantum dots / A. Polimeni, A. Patanè, M. Henini [et al.] // Phys. Rev. B. – 1999. – Vol. 59. – № 7. – P. 5064-5068.

10. *Dorogan V.G*. Hybridized quantum dot-wetting layer states in photoluminescence of In(Ga)As/GaAs dot chain samples / V.G. Dorogan1, Yu.I. Mazur, E.Jr. Marega [et al.] // J. Appl. Phys. – 2009. – Vol. 105. – № 12. – P. 124304-124307.

References

1. XIE, Q., MADHUKAR, A., CHEN, P., KOBAYASHI N.Vertically Self-Organized InAs Quantum Box Islands on GaAs(100) *Phys. Rev. Lett*. (1995) 75(13). p. 2542-2545.

2. WOLPERT, C., WANG, L., RASTELLI, A. [et al.] Transient absorption spectroscopy of a single lateral InGaAs quantum dot molecule *Phys. Stat. Sol.(b)*. (2012) 249(4) p. 731-736.

3. MOLDAVSKAYA, L.D., SHASHKIN, V.I., DROZDOV, M.N. [et al.] Infrared lateral photoconductivity of InGaAs quantum dot heterostructures grown by MOCVD *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. (2003) 17(3) p. 634-635.

4. NEDZINSKAS, R., ČECHAVIČIUS, B., KARPUS, V. [et al.] Photoreflectance and photoluminescence studies of epitaxial InGaAs quantum rods grown with As_2 and As_4 sources *J.Appl. Phys*. (2011) 109(12) p. 123526-123531.

5. BIMBERG, D. GRUNDMANN, M., LEDENTSOV, N. (1999) *Quantum dot heterostructures.* New York: Wiley.

6. HEITZ, R., RAMACHANDRAN, T.R., KALBURGE, A. [et al.] Observation of Reentrant 2D to 3D Morphology Transition in Highly Strained Epitaxy: InAs on GaAs *Phys. Rev. Lett*. (1997) 78(21) p.4071-4074.

7. KONDRATENKO, S.V., VAKULENKO, O.V., KUNETS, Vas.P., MAZUR, Yu.I. [et al.] Photoconductivity peculiarities in InGaAs quantum wire heterostructures: anisotropy and high photoresponsivity at room temperature *Semicond. Sci. Technol*. (2012) 27(10) p.105024.

8. MAZUR, Yu.I., DOROGAN, V.G., MAREGA, E. Cooperative Effects in the Photoluminescence of (In,Ga)As/GaAs Quantum Dot Chain Structures *Nanoscale Research Letters*. (2010) 5 p.991-1001.

9. POLIMENI, A., PATANÈ, A., HENINI, M. [et al.] Temperature dependence of the optical properties of $InAs/Al_yGa_{1-y}As$ self-organized quantum dots *Phys. Rev. B*. (1999) 59(7) p.5064-5068.

10. DOROGAN, V.G., MAZUR, Yu.I., MAREGA, E.Jr. [et al.] Hybridized quantum dot-wetting layer states in photoluminescence of In(Ga)As/GaAs dot chain samples *J. Appl. Phys.* (2009) 105(12) p.124304-124307.

Надійшла до редколегії 04.09.14

УДК 535.34, 535.37

Кутовий С. Ю.[1], к.ф.-м.н., доц.
Савчук Р. С.[2], студ.
Башмакова Н. В.[3], к.ф.-м.н., асист.

Параметри зв'язування алкалоїду сангвінарину з ДНК

[1,2,3]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Україна, 01601, місто Київ, вул. Володимирська, 64/13
e-mail: [1]sangulaire@gmail.com

S.Yu. Kutovyy[1], PhD, assoc.prof.
R. S. Savchuk[2], stud.
N. V. Bashmakova[3], PhD, assist.prof.

Binding parameters of sanguinarine to DNA

[1,2,3]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 64/13, Volodymyrska Street, City of Kyiv, Ukraine, 01601
e-mail: [1]sangulaire@gmail.com

Досліджено взаємодію рослинного алкалоїду сангвінарину з ДНК у водному розчині методами оптичної спектроскопії (поглинання, флюоресценція). Розглянуто залежності спектральних характеристик алкалоїду від співвідношення концентрацій пар основ ДНК та молекул алкалоїду P/D, визначено прояви зв'язування алкалоїду з ДНК. Показано, що характер зв'язування залежить від P/D. За допомогою модифікованих рівнянь Скетчарда та МакГі–фон Хіппеля визначено параметри зв'язування сангвінарину з ДНК.

Ключові слова: ДНК, сангвінарин, рівняння зв'язування, інтеркаляція, зовнішнє зв'язування, параметри зв'язування.

The interaction of plant alkaloid sanguinarine with DNA in aqueous solutions, by using optical spectroscopy methods (absorption and fluorescence) was studied. The dependencies of alkaloid spectral characteristics on the concentration ratio P/D between the DNA base pairs and alkaloid molecules in the solutions are considered in the P/D range of 0…22, the manifestations of the alkaloid-DNA binding are revealed. It was found that the dependencies of the optical parameters on P/D have a minimum at small P/D. The changes in optical parameters (the extinction coefficient, fluorescence intensity) were analyzed using a special program operating with the modified Scatchard and McGhee-von Hippel binding equations. It gave opportunity to avoid Scatchard plot building procedure which is too sensitive to experimental data precision. The character of binding is found to depend on P/D. Since two forms of sanguinarine are available in a solution, for calculation of binding parameters the concentrations of SaI and SaII separately from an initial sanguinarine concentration were determined: on the base of the fluorescence spectra the concentration dependence (the curves of a relative content of each form of sanguinarine as a function of pH) was constructed. The model of two binding modes was applied and it was established that the external binding prevails at small values of P/D (≤2) and intercalation at P/D≥6. The parameters of the binding with DNA are determined for external binding and intercalation. The general conclusion about the influence of ligand form on binding ways was also done.

Key Words: DNA, sanguinarine, binding equations, intercalation, external binding, binding parameters.

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

1. Вступ

Алкалоїд сангвінарин ($C_{20}H_{15}O_5N$ або $C_{20}H_{14}O_4NOH$ [1]) належить до групи бензофенантридинів. Молекула сангвінарину майже пласка, що робить її потенційним інтеркалятором в подвійну спіраль ДНК. Препарати сангвінарину проявляють бактерицидні, протизапальні а також протипухлинні [2] властивості.

Відомо [3], що сангвінарин у водних розчинах існує у двох формах – імінній (SaI, pH<6) та алканоламінній (SaII, pH > 8,5); перша з них є катіоном, інша – нейтральна (рис. 1).

Проведено чимало фізичних експериментів присвячених дослідженню взаємодії сангвінарину з ДНК (див., зокрема, [4-9] та огляди [3,10,11]). Взагалі алкалоїди ізохінолінового ряду взаємодіють з ДНК або як інтеркалятори, або ж розміщуються у малій борозенці ДНК. При

© С.Ю.Кутовий, Р.С.Савчук, Н.В. Башмакова, 2014

зв'язування з ДНК в спектрі поглинання проявляються батохромний (довгохвильовий зсув максимумів) та гіпохромний ефекти. Інтенсивність флюоресценції сангвінарину при додаванні в розчин молекул ДНК знижується, температура плавлення ДНК зростає, проявляються і інші ефекти.

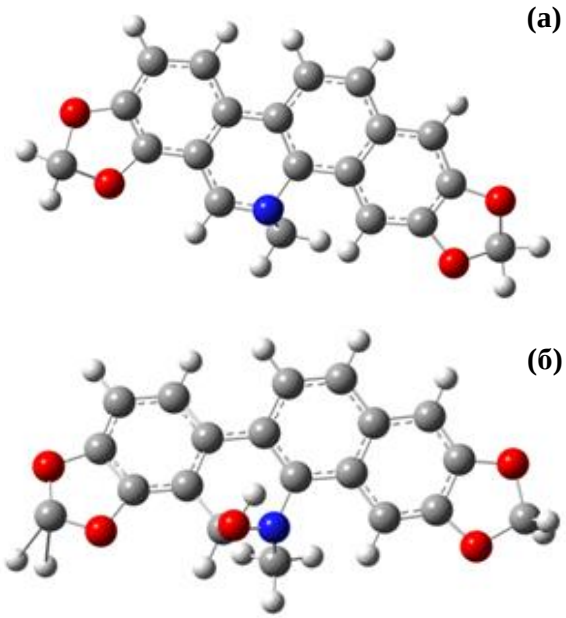


Рис. 1. Будова молекули сангвінарину (а – SaI, б - SaII).

В [6] наведено параметри зв'язування сангвінарину з ДНК, визначені за спектрами поглинання, а у [4] за спектрами поглинання та флюоресценції.

Сангвінарин викликає процеси розкручування-закручування в суперспіральних плазмідах ДНК з кутом розкручування 27°, з чого автори [3] роблять висновок про інтеркаляційний механізм зв'язування. Інтеркаляція сангвінарину в ДНК була також підтверджена авторами [6]. Дослідження впливу pH та іонної сили на зв'язування свідчать про суттєвий вплив цих факторів [7]. Взаємодія сангвінарину з ДНК також досліджувалась методами ЯМР [12]. Ці дослідження показали повну інтеркаляцію молекули в подвійну спіраль ДНК, навіть при високих температурах (~350 K). За результатами спектрофлюорометричних та спектрофотометричних досліджень визначено термодинамічні характеристики зв'язування сангвінарину з деякими B-ДНК з різною послідовністю основ в різних діапазонах температур та концентрацій солі натрію. В [6] показано утворення частково інтеркальованих в ДНК комплексів для обох форм сангвінарину – імінної та алканоламінної. Цей висновок був заперечений результатами роботи [9], де стверджується, що з ДНК взаємодіє лише одна з форм – імінна, оскільки вона заряджена та пласка, на відміну від нейтральної та вигнутої алканоламінної форми.

В роботі [4] було зроблено висновок про те, що для молекули сангвінарину характерними є два типи зв'язування: при P/D < 2 переважає зовнішнє зв'язування, при P/D > 6 – інтеркаляція. Також наведено параметри зв'язування сангвінарину з B-ДНК, які, проте, були розраховані з використанням загальної концентрації сангвінарину.

2. Зразки та техніка експерименту

Для проведення експериментів було використано сангвінарин (ІМБГ НАН України), виготовлений у вигляді мікрокристалічного порошку. Алкалоїд розчиняли у воді для ін'єкцій при температурі в інтервалі від 60-70°C. Концентрація сангвінарину в розчині становила 23.75 мкМ/л. Для дослідження було використано ДНК *Calf thymus* ("Serva", Німеччина). Середня молекулярна маса пари основ – близько 650 г/М. Під час дослідження розчину ДНК+Sa, концентрація алкалоїду залишалась сталою, але змінювалась концентрація ДНК. Співвідношення між концентрацією ДНК та концентрацією молекул алкалоїду виражає кількість пар основ ДНК на одну молекулу ліганду.

Спектри поглинання реєструвались на спектрофотометрі *Specord UV VIS* в діапазоні 200-700 нм. Роздільна здатність складала 1 нм. Спектри флюоресценції, спектри збудження поляризованої флюоресценції та поляризованої флюоресценції були отримані з використанням флюорометра *Cary Eclipse*, в діапазоні 300-800 нм. Спектральна ширина щілини для флуоресцентних вимірювань становила 5 нм. При отриманні спектрів поляризованої флюоресценції в якості поляризаторів використовувались призми Глана (діапазон пропускання від 300 нм) та плівковий поляризатор (діапазон пропускання від 200 нм), які ставились відповідно після монохроматора збудження та перед монохроматором випромінювання.

3. Обчислення параметрів зв'язування

Для визначення параметрів зв'язування ми використали програму *BindFit*. Ця програма дозволяє оперувати з прямими експериментальними даними без жодних координатних перетворень, відомих як «лінеаризація». Це дає можливість підвищити точність визначення параметрів для процесів, що характеризуються нелінійною кривою навіть після лінеаризації.

Головний принцип обробки даних цією програмою – апроксимація експериментальних значень за допомогою певного рівняння зв'язування. Класичним рівнянням для визначення константи зв'язування є рівняння Скетчарда [13]:

$$\frac{\nu}{c_f} = K \cdot (1-\nu) \quad (1)$$

де ν - співвідношення між концентрацією зв'язаних лігандів c_b і загальною кількістю місць зв'язування N, c_f - концентрація вільних лігандів і K - константа зв'язування. З ряду причин ця залежність може бути нелінійною, зокрема, якщо молекула ліганду займає більш, ніж одне місце зв'язування (а саме n місць) на матриці ДНК. Тоді рівняння виглядає як $\nu/c_f = K \cdot (1-n\nu)$, але і воно не завжди є коректним (зокрема, із-за заниження загальної кількості вільних місць зв'язування). МакГі та фон Хіппель [14] удосконалили підхід Скетчарда, поширивши його на випадок $n > 1$, та коректно визначивши кількість незайнятих місць зв'язування. Рівняння МакГі – фон Хіппеля для некооперативного (2) та кооперативного (3) зв'язування мають вигляд:

$$\frac{\nu}{c_f} = K(1-n\nu)\cdot\left(\frac{1-n\nu}{1-(n-1)\nu}\right)^{n-1} \quad (2)$$

$$\frac{\nu}{c_f} = K\cdot(1-n\nu)\cdot\left(\frac{(2\omega-1)(1-n\nu)+\nu-R}{2(\omega-1)(1-n\nu)}\right)^{n-1}\times \times\left(\frac{1-(n+1)\nu+R}{2(1-n\nu)}\right)^{2} \quad (3)$$

де ω – параметр кооперативності,

$$R = \sqrt{(1-(n+1)\nu)^2 + 4\omega\nu(1-n\nu)}\,.$$

Модифіковані рівняння

Один тип місць зв'язування. Вихідні рівняння МакГі-фон Хіппеля були перетворені від оригінальної форми (2,3) до форми, яка включала в себе лише змінні, що отримувались безпосередньо з експерименту. Як правило, експериментально вимірюється залежність певного оптичного параметра розчину від концентраційного співвідношення розчинених компонент, зазвичай, це співвідношення між загальною концентрацією місць зв'язування та загальною концентрацією лігандів, N/c (тут $N/c \equiv$ P/D). Ці концентрації є відомими, на відміну від концентрацій зв'язаних чи вільних лігандів. Тому такі змінні як загальна концентрація лігандів, c, і кількість місць зв'язування, N, є більш доцільними для процесу обчислень. В такому випадку залишається лише одна невідома змінна у рівнянні, яка може бути визначена чисельно. В результаті ряду простих перетворень рівняння МакГі – фон Хіппеля зводяться до рівнянь відносно змінної c_b – концентрації зв'язаних лігандів:

$$K\cdot(c-c_b)\cdot(N-nc_b)\cdot\left(\frac{N-nc_b}{N-(n-1)c_b}\right)^{n-1} - c_b = 0 \quad (4)$$

$$K\cdot(c-c_b)\cdot(N-nc_b)\cdot\left(\frac{(2\omega-1)(N-nc_b)+c_b-R'}{2(\omega-1)(N-nc_b)}\right)^{n-1}\times \times\left(\frac{N-(n+1)c_b+R'}{2(N-nc_b)}\right)^{2} - c_b = 0 \quad (5)$$

$$R' = \sqrt{(N-(n+1)c_b)^2 + 4\omega c_b(N-nc_b)}$$

Ці рівняння були реалізовані в програмі і розв'язані чисельно. Це дозволило працювати з концентрацією c_b як з функцією $c_b=c_b(N,c;K,n)$.

Два типи місць зв'язування. У цьому випадку процеси зв'язування описуються системою двох рівнянь, яка повинна брати до уваги, чи є процеси зв'язування лігандів, які займають одне місце зв'язування (тобто пари основ і фосфатні групи), взаємозалежними чи ні. Якщо параметр N позначає концентрацію пар основ ДНК, то $2N$ – кількість місць зв'язування відповідає за перший тип зв'язування (з фосфатами) і N – кількість місць зв'язування, що відповідає інтеркаляції.

Для наших експериментальних даних найкращі результати апроксимації були отримані з використанням системи модифікованих рівняння Скетчарда (для зовнішнього зв'язування) і МакГі-фон Хіппеля (для інтеркаляції). Система описує два незалежні процеси зв'язування лігандів, що займають одне місце зв'язування. Інтеркаляція в інтервал між парами основ можлива лише при умові, що обидва фосфати не зв'язані з лігандом і навпаки, тобто зв'язування з фосфатами можливе лише тоді, якщо жоден ліганд не інтеркалював у відповідний інтервал. Вважається неможливим процес прямого переходу зв'язаного ліганду між місцями зв'язування різних типів, крім того, повинно бути не менше ніж $n-1$ вільних інтервалів між двома лігандами, що інтеркалювали. Така модель описується наступною системою рівнянь:

$$\begin{cases} c_b^{(1)} = K_1\left(c - c_b^{(1)} - c_b^{(2)}\right)\cdot\left(2N - c_b^{(1)}\right)\cdot\left(1 - \dfrac{c_b^{(2)}}{N}\right) \\ c_b^{(2)} = K_2\left(c - c_b^{(1)} - c_b^{(2)}\right)\cdot\left(N - nc_b^{(2)}\right)\times \\ \times\left(\dfrac{N - nc_b^{(2)}}{N - (n-1)c_b^{(2)}}\right)^{n-1}\cdot\left(1 - \dfrac{c_b^{(1)}}{2N}\right)^2 \end{cases} \quad (6)$$

де $c_b^{(1)}$ і $c_b^{(2)}$ – концентрації лігандів, зв'язаних з місцями першого (зовнішнє зв'язування) і другого (інтеркаляція) типів, K_1 і K_2 – константи зв'язування - для зовнішнього зв'язування та інтеркаляції відповідно. Важливо, що в рівняннях для незалежних процесів виникає додатковий множник; були і деякі важливі обмеження [4]. Крім того, у програмі було враховано значення pH розчину (тобто вміст йонів H^+), що дало можливість визначити кількість зовнішніх місць зв'язування більш точно (не тільки 2*N*). В цілому, рівняння мають декілька розв'язків, але, як виявилося, лише один з них задовольняє необхідним обмеженням у робочому діапазоні параметрів.

Детальніше про модифіковані рівняння зв'язування див. [4].

4. Експериментальні результати

Взаємодія алкалоїдів з ДНК характеризується рядом характерних ознак, які проявляються у спектрах поглинання та флюоресценції. Такими ознаками є гіпохромізм смуги поглинання алкалоїду, «червоний» та «синій» зсув максимумів смуг поглинання та флюоресценції, зміна квантового виходу флюоресценції. Показовими є також зміни в спектрах поляризованої флюоресценції. Ці та інші прояви зв'язування сангвінарину з ДНК були спостережені в оптичних спектрах; побудовано залежності відповідних спектральних характеристик від P/D.

4.1. Зміни у спектрах поляризованої флюоресценції сангвінарину у присутності молекул ДНК. Для аналізу зв'язування сангвінарину з ДНК було отримано ряд спектрів поляризованої флюоресценції розчинів Sa+ДНК при різних значеннях P/D. Для прикладу деякі з них наведено на рис. 2 та рис. 3.

Ступінь анізотропії флюоресценції визначається виразом [15]:

$$r = \frac{I_{\parallel} - I_{\perp}}{I_{\parallel} + 2\cdot I_{\perp}} \quad (7)$$

де $I_{\parallel}$ та $I_{\perp}$ – відповідно паралельна та перпендикулярна до напрямку збуджуючих коливань (вертикальних) складові інтенсивності флюоресценції. Оскільки дифракційна гратка монохроматора має різну чутливість до світла вертикальної та горизонтальної поляризацій, експериментально ступінь анізотропії флюоресценції визначався згідно виразу:

$$r = \frac{I_{vv} - G\cdot I_{vh}}{I_{vv} + 2\cdot G\cdot I_{vh}} \quad (8)$$

де I_{vv} та I_{vh} – інтенсивності флюоресценції при вертикальній поляризації світла збудження та відповідно вертикальній та горизонтальній поляризації флюоресцентного випромінювання, *G*-фактор є відношенням чутливостей каналу детекції до вертикально та горизонтально поляризованого світла, експериментально визначається як $G=I_{hv}/I_{hh}$. Із врахуванням *G*-фактора формула (7) набуває вигляду:

$$r = \frac{I_{vv} - (I_{hv}/I_{hh})\cdot I_{vh}}{I_{vv} + 2\cdot(I_{hv}/I_{hh})\cdot I_{vh}} \quad (9)$$

де I_{hv} та I_{hh} – інтенсивності флюоресценції при горизонтальній поляризації світла збудження та відповідно вертикальній та горизонтальній поляризації флюоресцентного випромінювання.

Ступінь анізотропії обчислювався за результатами чотирьох сканувань необхідного інтервалу довжин хвиль при чотирьох можливих взаємних положеннях поляризаторів збудження та випромінювання згідно виразу (9).

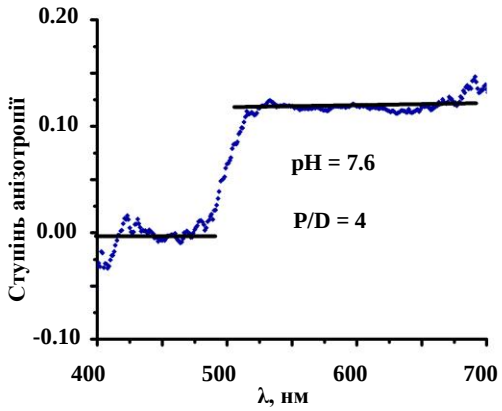


Рис. 2. Залежність ступеня анізотропії *r* від довжини хвилі.

Для сангвінарину при малих P/D характерним є зовнішній тип зв'язування, при більших – інтеркаляція. Оскільки рухливість молекули барвника зменшується незалежно від способу фіксації на матриці ДНК, то ступінь анізотропії мав би монотонно зростати. Проте, як виявилось, при P/D ~ 1 крива має мінімум (рис. 3). Можливою причиною такої залежності може бути те, що при малих P/D зв'язування з ДНК міняє початкову орієнтацію дипольних

моментів переходу при поглинанні та флюоресценції; проте питання вимагає додаткових досліджень. Швидкий вихід на насичення залежності *r* (P/D) вказує на те, що вже при P/D = 5 з ДНК зв'язалась максимально можлива в даних умовах кількість молекул алкалоїду. При цьому більше значення ступеня анізотропії для більших P/D означає збільшення рівня фіксації сангвінарину на матриці ДНК, що є характерним для зв'язування за інтеркаляційним механізмом. Крім того, ступінь анізотропії для імінної форми сангвінарину значно вищий (рис. 2), це означає, що алканоламінна форма зв'язується суттєво слабше.

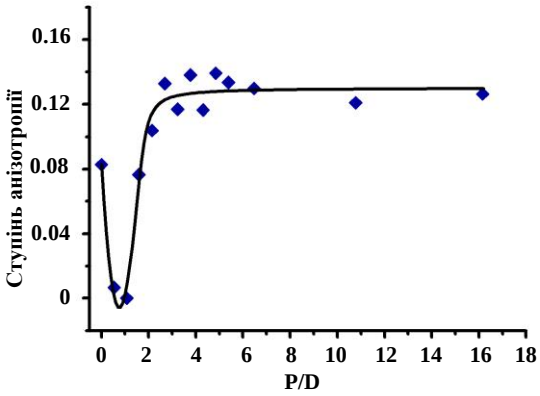


Рис. 3. Залежність ступеня анізотропії (r) смуги 587 нм (SaI) від P/D.

4.2. Вплив pH розчину на спектральні властивості сангвінарину. При дослідженні розчинів сангвінарину, важливо знати pH розчинника (у нашому випадку води), оскільки в залежності від pH середовища сангвінарин може існувати у двох різних формах: імінній (SaI, pH = 1-6), та алканоламінній (SaII, pH = 8-12). Відповідно, при значеннях pH водних розчинів, близьких до нейтральних (pH = 6-8), сангвінарин в розчинах присутній в обох формах. Оскільки, як показано в попередніх дослідженнях, з ДНК

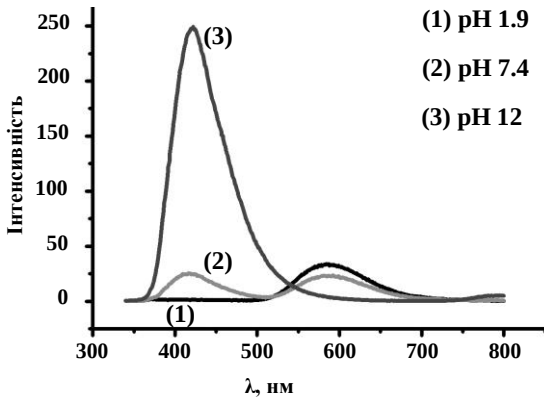


Рис. 4. Спектри флюоресценції сангвінарину при різних pH.

взаємодіють обидві форми сангвінарину, для визначення параметрів зв'язування необхідно знати концентрації обох форм SaI та SaII, наявних в розчині.

Для їх визначення було проведено певні додаткові експерименти і виконано деякі розрахунки. По-перше, було отримано ряд (~10) спектрів флюоресценції водних розчинів сангвінарину при різних значеннях pH, в діапазоні від 2 до 12 (деякі з них показано на рис. 4); pH розчинів забезпечувалось додаванням певної кількості лугу NaOH або кислоти HCl. Реєструвалась інтенсивність смуг ФЛ, відповідних кожній формі сангвінарину (587 нм для SaI, та 419 нм для SaII).

Далі, за результатами цих вимірювань була побудована "концентраційна" залежність (рис. 5). Концентраційна залежність – нормовані до одиниці залежності від pH інтенсивностей (а оскільки інтенсивність флюоресценції лінійно залежить від концентрації, то можна замінити відношення інтенсивностей на відношення концентрацій) максимумів кожної із смуг флюоресценції (для двох форм Sa).

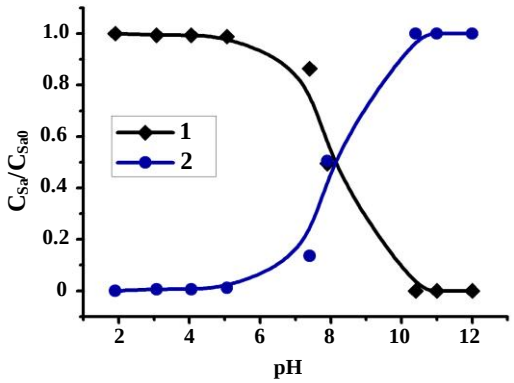


Рис. 5. "Концентраційна" залежність.

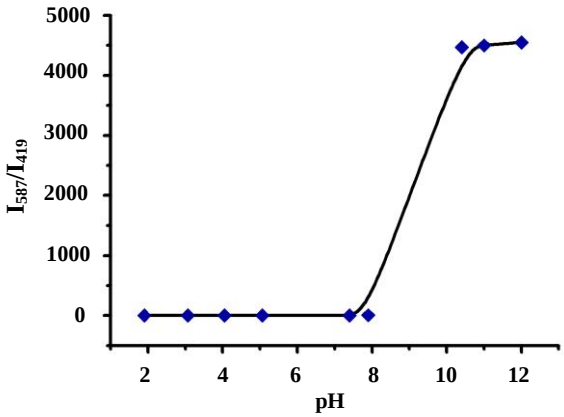


Рис. 6. Крива для визначення pH.

Також було побудовано залежність величини відносної інтенсивності флюоресценції

(відношення інтенсивності флюоресценції смуги 587 нм до інтенсивності флюоресценції смуги 419 нм) від pH (рис. 6).

"Концентраційна" залежність необхідна для визначення концентрації кожної з форм сангвінарину у розчині при відомому pH, якщо відома загальна концентрація алкалоїду. В свою чергу, pH визначалось зі спектрів флюоресценції за допомогою залежності відносної інтенсивності від pH середовища (знаючи відношення інтенсивностей смуг флюоресценції сангвінарину розчину із P/D=0).

4.3. Зміни у спектрах флюоресценції сангвінарину у присутності молекул ДНК. У наших експериментах pH був близько 7.6, отже, обидві форми були присутні. Спектр флюоресценції складається з двох смуг з максимумами на 587 нм (SaI) та 419 нм (SaII), (рис. 7), яким відповідають різні спектри збудження.

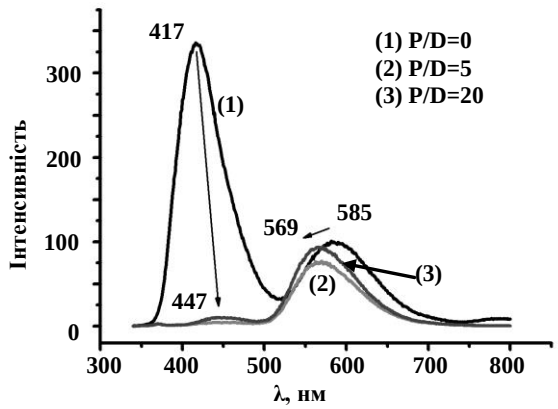


Рис. 7. Спектри флюоресценції сангвінарину при різних P/D.

З додаванням ДНК у спектрах флюоресценції сангвінарину спостерігається зміна інтенсивності флюоресценції і зсув максимуму смуги (блакитний ~20 нм для SaI і червоний ~30 нм для SaII). Зміна інтенсивності флюоресценції (та оптичної густини) для сангвінарину від співвідношення P/D – нетипова. А саме – відповідні криві мають мінімум (рис. 8), і така поведінка спостерігається для обох форм. Така ж залежність була отримана у роботі [5] без пояснення.

Цю нетипову зміну оптичного параметру ліганду можна пояснити як прояв двох типів зв'язування сангвінарину та ДНК: зовнішнього та інтеркаляції. Мінімум у залежностях відповідає найбільш компактному розміщенню молекул сангвінарину на матриці ДНК, що призводить до гіпохромізму у смугах поглинання та гасіння флюоресценції. При малих значеннях P/D найбільш ймовірним механізмом зв'язування є механізм зовнішнього стекінгу. Коли концентрація ДНК зростає – зростає також і кількість місць зв'язування, тому найбільш ймовірним стає інтеркаляційний тип зв'язування.

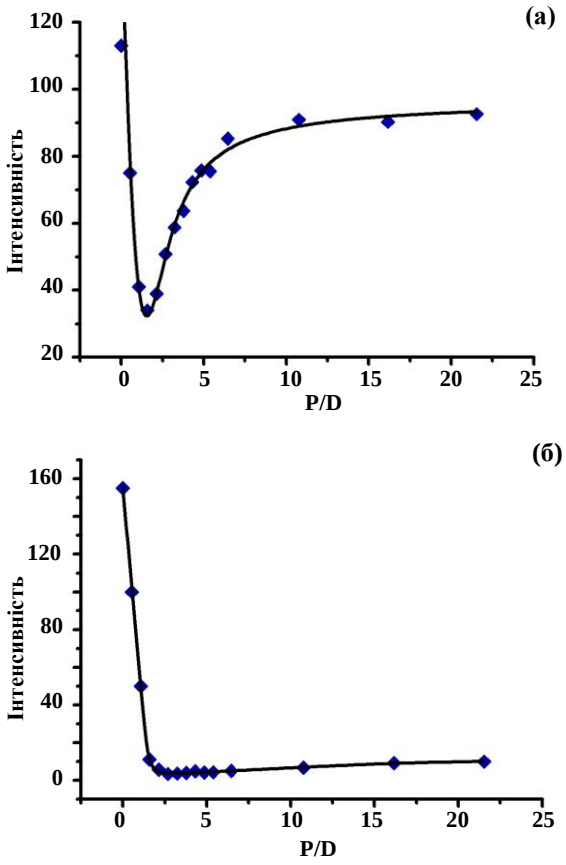


Рис. 8. Криві зв'язування для імінної SaI (а) та алканоламінної SaII (б) форм.

Оскільки у розчині одночасно присутніми є дві форми сангвінарину, то для обрахунку параметрів зв'язування необхідно визначити концентрації SaI та SaII виходячи із значення загальної концентрації сангвінарину у розчині (23.75 мкМ). Визначені концентрації сангвінарину становлять 16.38 (SaI) і 7.37 (SaII) мкМ.

Оскільки залежності інтенсивності флюоресценції від концентрації ДНК у розчинах Sa+ДНК є нетривіальними, то застосовувати рівняння МакГі–фон Хіппеля безпосередньо не можна. Експериментальні дані найкраще описуються системою (6), яка враховує два незалежні процеси зв'язування ліганду, а саме зовнішнє зв'язування з фосфатами та інтеркаляція в подвійну спіраль ДНК.

Обчислені параметри зв'язування для SaI і SaII представлено у табл. 1.

Таблиця 1

	SaI (імінна)	SaII (алканоламінна)
K_1	(2.5±0.4) 10^6 M^{-1}	(1.8±0.4) 10^6 M^{-1}
K_2	(26.7±5.7) 10^6 M^{-1}	(4.5±0.7) 10^6 M^{-1}
n	2.3±0.1	14.1±0.3

У [11] представлено значення константи зв'язування (*calf thymus* ДНК) для імінної форми сангвінарину, отримане з використанням рівняння МакГі-фон Хіппеля для некооперативного зв'язування: K= 0.94 10^6 M^{-1}, n=1.7. У [9] константи визначено за допомогою рівняння Скетчарда: K = 1.5 10^7 M^{-1} (у буфері pH=5.2) та K_2 = 7.5 10^6 M^{-1} (у буфері pH=10.4). У цих експериментах крива зв'язування сангвінарину була стандартна (без мінімуму).

5. Висновки

Отже, на основі модифікованих рівнянь Скетчарда та МакГі-фон Хіппеля було визначено параметри зв'язування сангвінарину з ДНК.

За результатами отриманих спектрів флюоресценції водних розчинів сангвінарину при різних значеннях pH побудовано "концентраційну" залежність та залежність відносної інтенсивності фотолюмінесценції кожної з форм сангвінарину від pH, що дозволило визначати концентрації обох форм сангвінарину в розчині.

Отримано спектри флюоресценції розчинів Sa+ДНК при різних значеннях P/D. При цьому зміна інтенсивності ФЛ в залежності від P/D описується не типовою залежністю - криві проходять через мінімум, і така поведінка спостерігається для обох форм сангвінарину.

Встановлено, що для обох форм сангвінарину характерними способами зв'язування з ДНК є як інтеркаляція (при P/D ≥ 6) так і, при малих P/D (≤ 2), зовнішнє зв'язування. При цьому, алканоламінна форма зв'язується з ДНК суттєво слабше ніж імінна; це випливає також з аналізу спектрів поляризованої флюоресценції.

З використанням спеціальної програми за результатами аналізу спектрів флюоресценції визначено параметри зв'язування: константи зв'язування K_1, K_2 для зовнішнього зв'язування та інтеркаляції, відповідно, та n – кількість місць зв'язування, які займає ліганд при фіксації на матриці ДНК.

На підставі цієї та інших наших робіт [4,16] можна зробити досить загальний висновок щодо впливу форми молекули ліганду на криву зв'язування, а отже і на механізми зв'язування, які можуть реалізуватися: якщо молекула ліганду пласка, вона інтеркалює в подвійну спіраль ДНК "більш повно"; це означає, що можуть реалізуватись обидва механізми зв'язування – зовнішнє та інтеркаляція. Якщо ж частина ліганду не лежить в основній площині молекули, то ця частина розміщується в малій борозенці, тим самим виключаючи зовнішні місця зв'язування при малих P/D. Ми спостерігали зовнішнє зв'язування і інтеркаляцію для пласких молекул сангвінарину і акридину оранжевого та лише інтеркаляцію для частково пласких молекул берберину та етидію броміду.

Список використаних джерел

1. *Орехов А. П.* Химия алкалоидов. / А. П. Орехов.– Москва: Изд. АН СССР, 1955.–863 с.
2. *Jang B.-C.* Sanguinarine induced apoptosis in A549 human lung cancer cells primarily via cellular glutathione depletion / B.-C. Jang, J.-G. Park, D.-K. Song, W.-K. Baek, S. K. Yoo, K.-H. Jung, G.-Y. Parke, T.-Y. Lee, S.-I. Suh // Toxicology in Vitro. – 2009.– **23.–** P.281-287.
3. *Maiti M.* Molecular aspects on the interaction of protoberberine, benzophenanthridine, and aristolochia group of alkaloids with nucleic acid structures and biological perspectives / M. Maiti, G. S. Kumar// Medicinal research reviews – 2007. – **27**. – P.649-695.
4. *Gumeniuk V.* Binding Parameters of Alkaloids Berberine and Sanguinarine with DNA / V.Gumeniuk, N. Bashmakova, S. Kutovyy, V. Yashchuk, L. Zaika // Ukr. J. Phys. – 2011. – **56**. **–** P.524-533.
5. *Urbanova J.* Fluorescence properties of selected benzo[c]phenantridine alkaloids and studies of their interaction with CT DNA / J. Urbanova, P. Lubal, I. Slaninova, E. Taborska, P. Taborsky // Anal. Bioanal. Chem.–2009.– **394**. – P.997-1002.
6. *Smekal E.* Interaction of benzophenantridine alkaloid sanguinarine with DNA / E. Smekal, N. Kubova, V. Kleinwachter // Stud. Biophys. – 1984. – **114**. – P. 125-132.
7. *Maiti M.* Circular dichroism of sanguinarine DNA complex: Effect of base composition pH and ionic strength / M. Maiti, R. Nandi // J. Biomol. Struct. Dyn. – 1987. – **5**. – P.159-175.
8. *Sen A.* Thermodynamics of the interactions of sanguinarine with DNA: Influence of ionic strength and base composition / A. Sen, A. Ray, M. Maiti // Biophys.Chem.–199.–**59**.– P.155-170.

9. *Maiti M.* Influence of DNA structures on the conversion of sanguinarine alkanolamine form to iminium form / M. Maiti, S. Das, A. Sen, A. Das, G. S. Kumar, R. Nandi // J. Biomol. Struct. Dyn. – 2002. – **20**. – P.455-464.
10. *Grycova L*. Quaternary protoberberine alkaloids / L. Grycova, J. Dostal, R. Marek // Phytochemistry. – 2007. – **68**. – P.150-175.
11. *Maiti M., Kumar, G.S.,* Polymorphic Nucleic Acid Binding of Bioactive Isoquinoline Alkaloids and Their Role in Cancer / M. Maiti, G. S. Kumar // J.Nucl. Acids,–2010;v.2010, Article ID 593408, 23 p. http://dx.doi.org/10.4061/2010/593408.
12. *Pilch D. S.* Minor groove-directed and intercalative ligand-DNA interactions in the poisoning of human DNA topoisomerase I by protoberberine analogs / D. S. Pilch, C. Yu, D. Makhey, E. J. LaVoie, A. R. Srinivasan, W. K. Olson, R. R. Sauers, K. J. Breslauer, N. E. Geacintov and L. F. Liu // Biochemistry – 1997.– **36**. – P.12542- 12553.
13. *Scatchard G.* The attractions of proteins for small molecules and ions / G. Scatchard // Ann. N.Y. Acad. Sci. – 1949. – **51**. – P.660-672.
14. *McGhee J.D.* Theoretical aspects of DNA-Protein interactions: co-operative and non-co-operative binding of large ligands to a one-dimensional homogeneous lattice / J. D. McGhee, P. H von Hippel // J. Mol. Biol. – 1974. – **86**. – P.469-489.
15. *Лакович Дж.Р.* Основы флуоресцентной спектроскопии / Дж. Р. Лакович. – Москва: Мир, 1986. – 496 с.
16. *Кутовий С. Ю.* Особливості зв'язування бромистого етидію та акридинового оранжевого з ДНК / С. Ю. Кутовий, Т. П. Сич, Л. А. Заїка // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка, сер. фіз.-мат. науки – 2014. – №3, цей випуск.

References

1. OREKHOV, A. P. (1955) *Khimiya alkaloidov*. Moscow: Izdatyelstvo akadyemii nauk SSSR.
2. JANG, B.-C., PARK, J.-G., SONG, D.-K. et al. (2009) Sanguinarine induced apoptosis in A549 human lung cancer cells primarily via cellular glutathione depletion. *Toxicology in Vitro.* 23. p.281-287.
3. MAITI, M. and KUMAR, G. (2007) Molecular aspects on the interaction of protoberberine, benzophenanthridine, and aristolochia group of alkaloids with nucleic acid structures and biological perspectives. *Medicinal research reviews.* 27. p.649-695.
4. GUMENIUK, V., BASHMAKOVA, N., KUTOVYY, S. et al. (2011) Binding Parameters of Alkaloids Berberine and Sanguinarine with DNA. *Ukr. J. Phys*. 56. p.524-533.
5. URBANOVA, J., LUBAL, P., SLANINOVA, I. et al. (2009) Fluorescence properties of selected benzo[c]phenantridine alkaloids and studies of their interaction with CT DNA. *Anal.Bioanal.Chem.* 394. p.997-1002.
6. SMEKAL, E., KUBOVA, N., and KLEINWACHTER, V. (1984) Interaction of benzophenantridine alkaloid sanguinarine with DNA. *Stud. Biophys.* 114. p. 125-132.
7. MAITI, M., NANDI, R. (1987) Circular dichroism of sanguinarine DNA complex: Effect of base composition pH and ionic strength. *J. Biomol. Struct. Dyn.* 5. p.159-175.
8. SEN, A., RAY, A. and MAITI, M. (1999) Thermodynamics of the interactions of sanguinarine with DNA: Influence of ionic strength and base composition. *Biophys. Chem.* 59. p.155-170.
9. MAITI, M., DAS, S., SEN, A. et al. (2002) Influence of DNA structures on the conversion of sanguinarine alkanolamine form to iminium form. *J. Biomol. Struct. Dyn.* 20. p.455-464.
10. GRYCOVA, L., DOSTAL, J., MAREK, R. (2007) Quaternary protoberberine alkaloids. *Phytochemistry*. 68(2), p.150-175.
11. MAITI, M. and KUMAR, G. (2010) Polymorphic Nucleic Acid Binding of Bioactive Isoquinoline Alkaloids and Their Role in Cancer. *J. Nucl. Acids* [Online] – v.2010, ID 593408, 23p. Available:http://dx.doi.org/10.4061/2010/593408.
12. PILCH, D.S., YU, C., MAKHEY, D. et al. (1997) Minor groove-directed and intercalative ligand-DNA interactions in the poisoning of human DNA topoisomerase I by protoberberine analogs. *Biochemistry.* 36. p.12542-12553.
13. SCATCHARD, G. The attractions of proteins for small molecules and ions. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 51. p.660-672.
14. MCGHEE, J. and VON HIPPEL, P. (1974) Theoretical aspects of DNA-Protein interactions: co-operative and non-co-operative binding of large ligands to a one-dimensional homogeneous lattice. *J. Mol. Biol.* 86. p.469-489.
15. LAKOWICZ, J. R. Principles of Fluorescence Spectroscopy. – NewYork-London: Plenum Press, 1983.
16. KUTOVYY, S., SYCH, T. and ZAIKA, L. (2014) Peculiarities of ethidium bromide and acridine orange binding to DNA. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series Physics and Mathematics*, No3,this issue.

Надійшла до редколегії 22.05.2014

УДК 535.34;37

Кутовий С.Ю.[1], к.ф.-м.н., доц.,
Сич Т.П.[2], студ.
Заїка Л.А.[3]. к.б.н., с.н.с.

Особливості зв'язування бромистого етидію та акридинового оранжевого з ДНК

[1,2]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Україна, 01601, м. Київ, вул. Володимирська, 64/13
e-mail: [1]sangulaire@gmail.com
[3]Інститут молекулярної біології та генетики, Україна, м.Київ, вул. акад. Заболотного, 150.

S. Kutovyy[1], PhD, assoc.prof.
T. Sych[2], stud.
L. Zaika[3], PhD, sen.sci.res.

Peculiarities of ethidium bromide and acridine orange binding to DNA

[1,2]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 64/13, Volodymyrska Street, Kyiv, Ukraine, 01601.
e-mail: [1] sangulaire@gmail.com
[3]Institute of Molecular Biology and Genetics, 150, Acad. Zabolotnyi Str., Kyiv, Ukraine

Представлено результати порівняльного дослідження методами оптичної спектроскопії взаємодії бромистого етидію (фенантредини), акридинового оранжевого (піридини) з ДНК в водних розчинах. Розглянуто залежності спектральних характеристик барвників від концентраційних співвідношень P/D між кількістю пар основ ДНК та кількістю молекул барвника у розчині. Показано, що характер зв'язування залежить від P/D. Визначено параметри зв'язування для зовнішнього зв'язування та інтеркаляції з використанням модифікованих рівнянь Скетчарда та МакГі-фон Хіппеля. Показано вплив форми ліганду на тип зв'язування.

Ключові слова: *ДНК, ліганд, рівняння зв'язування, інтеркаляція, зовнішнє зв'язування.*

The comparative study the interaction of ethidium bromide, acridine orange with DNA in aqueous solutions using the optical spectroscopy methods (absorption and fluorescence) is presented. The dependencies of ligands spectral characteristics on the concentration ratio P/D between the DNA base pairs and ligands molecules in the solutions were studied in the P/D range of 0…20. The character of binding is found to depend on P/D. Some specific features in binding process at small values of P/D were observed. The changes in optical parameters (the extinction coefficient, fluorescence intensity) were analyzed using a special program operating with the modified Scatchard and McGhee-von Hippel binding equations. The parameters of the binding with DNA are determined for external binding and intercalation. It was found that for acridine orange the dependencies of the optical parameters on P/D have a minimum at small P/D. The model of two binding modes was applied and it was established that the external binding takes place at small values of P/D (≤1) and intercalation at P/D≥2. For ethidium bromide the dependence of the optical parameters on P/D has an s-like form at small P/D. It was found the only intercalation mode of binding for ethidium bromide but under essential influence of pH. The general conclusion about the influence of ligand form on binding ways was done.

Key Words: DNA, ligand, binding equations, intercalation, external binding.

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

1. Вступ

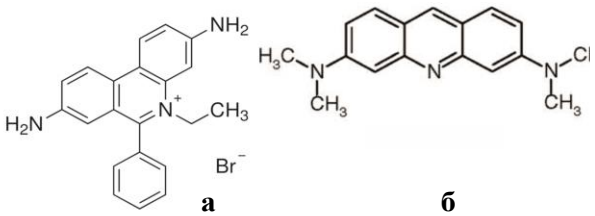
На даний момент існує низка порівняно токсичних препаратів, що викликають руйнацію пухлинної клітини, зв'язуючись з ДНК, а тому вивчення процесів взаємодії між малими лігандами та ДНК є дуже важливим для створення ефективних малотоксичних протипухлинних препаратів на базі натуральних алкалоїдів.

Ця робота продовжує наші дослідження [1], що стосуються вивчення процесів зв'язування ДНК та малих лігандів. Об'єктами дослідження є бромистий етидій (EtBr, структурна група фенантрединів) та акридиновий оранжевий (АО, група піридинів). Структурні формули, акридинового оранжевого - $C_{17}H_{19}N_3$, бромистого етидію - $C_{21}H_{20}BrN_3$ представлено на рис. 1. Барвники EtBr та АО добре зв'язуються з ДНК та використовуються як флуоресцентні мітки.

Обидва можуть бути використані як «модельні» зразки для дослідження зв'язування малих лігандів з нуклеїновими кислотами. Взаємодія лігандів EtBr та АО з ДНК вивчалась в

© С.Ю. Кутовий, Т. П. Сич, Л. А.Заїка, 2014

багатьох роботах, зокрема [2-4]. EtBr та AO взаємодіють з ДНК як інтеркалятори, повні чи часткові. Зазвичай експериментальні результати процесів зв'язування аналізують за допомогою графіків в координатах Скетчарда. Проте використання цих координат має ряд суттєвих недоліків [1,5]. Крім того, незважаючи на значну кількість робіт стосовно обраних зразків, деякі суттєві особливості їхніх оптичних спектрів, і, відповідно, кривих зв'язування не були описані в літературі.



а **б**

Рис. 1. Бромистий етидій (а) та акридиновий оранжевий (б).

У цій роботі було отримано залежності спектральних характеристик EtBr та AO від співвідношення (P/D) між кількістю пар основ ДНК та кількістю молекул ліганду. Ці характеристики були використані для визначення параметрів зв'язування за допомогою, як ми вважаємо, коректної системи модифікованих рівнянь Скетчарда та МакГі-фон Хіппеля з незалежними змінними.

2. Зразки та техніка експерименту

Було використано барвники бромистий етидій та акридиновий оранжевий у формі мікрокристалічних порошків (надані ІМБГ НАНУ). Останні були розчинені у воді для ін'єкцій при кімнатній температурі. Концентрація лігандів варіювалась в межах 6…50 мкМ. Використовувалась ДНК *calf thymus* ("Serva", Heidelberg, Germany). Середня молярна маса пари нуклеотидів становила близько 650 Da. При вимірах концентрація лігандів в розчинах ліганд+ДНК була сталою, а концентрація ДНК – змінною. Співвідношення між молярними концентраціями ДНК та лігандів (P/D) було виражене як відношення кількості пар нуклеотидів на одну молекулу ліганду.

Спектри поглинання були записані на спектрофотометрі *Specord UV VIS* в діапазоні 200–700 нм, роздільна здатність – 1 нм. Спектри флюоресценції (ФЛ) в діапазоні 300-800 нм було отримано з використанням флюорометра *Cary Eclipse*. Спектральна ширина щілини для флуоресцентних вимірів становила 5 нм.

3. Обчислення параметрів зв'язування

Параметри зв'язування визначались за допомогою спеціально розробленої програми *BindFit*. Її особливістю є пряма робота з експериментальними даними, тобто відсутність будь-яких перетворень координат, відомих як "лінеаризація". Це дозволило підвищити точність визначення параметрів для процесів, що описуються нелінійними графіками навіть після лінеаризації. Головний принцип обробки даних за допомогою цієї програми – апроксимація експериментальних точок за допомогою деякого рівняння зв'язування. Класичним є рівняння Скетчарда [6]:

$$\frac{\nu}{c_f} = K \cdot (1-\nu). \qquad (1)$$

де ν - співвідношення між концентрацією зв'язаних лігандів c_b і загальною кількістю місць зв'язування N, c_f - концентрація вільних лігандів, K - константа зв'язування. З певних причин ця залежність може бути нелінійною, зокрема, якщо молекула ліганду займає більш ніж одне місце зв'язування (а саме n місць) на матриці ДНК. Тоді рівняння виглядає як $\nu/c_f = K \cdot (1-n\nu)$, але і воно не завжди є коректним (зокрема, із-за заниження загальної кількості вільних місць зв'язування). МакГі та фон Хіппель [7] з використанням теорії ймовірності удосконалили підхід Скетчарда, поширивши його на випадок для $n > 1$. Крім того, вони коректно визначили кількість вільних місць зв'язування. Рівняння МакГі–фон Хіппеля для некооперативного та кооперативного зв'язування, відповідно:

$$\frac{\nu}{c_f} = K(1-n\nu) \cdot \left(\frac{1-n\nu}{1-(n-1)\nu} \right)^{n-1} \qquad (2)$$

$$\frac{\nu}{c_f} = K \cdot (1-n\nu) \cdot \left(\frac{(2\omega-1)(1-n\nu)+\nu-R}{2(\omega-1)(1-n\nu)} \right)^{n-1} \cdot \left(\frac{1-(n+1)\nu+R}{2(1-n\nu)} \right)^{2} \qquad (3)$$

де ω – параметр кооперативності,

$$R = \sqrt{(1-(n+1)\nu)^2 + 4\omega\nu(1-n\nu)}.$$

Модифіковані рівняння.

Один тип місць зв'язування. Спершу рівняння МакГі – фон Хіппеля були перетворені з їхньої оригінальної форми (2,3) до такої, яка включала в себе лише змінні, що отримувались безпосередньо з експерименту. Як правило, експериментально вимірюється залежність певного оптичного параметра розчину від концентраційного співвідношення розчинених компонент, зазвичай, це співвідношення між загальною концентрацією місць зв'язування та загальною концентрацією

лігандів, *N/c* (тут *N/c* ≡ P/D). Ці концентрації, на відміну від концентрацій зв'язаних чи вільних лігандів, є відомими. Тому такі змінні як загальна концентрація лігандів, *c*, і місць зв'язування, *N*, є більш доцільними для комп'ютеризованого процесу. У цьому випадку, залишається лише одна невідома змінна у рівнянні, яка може бути визначена чисельно. Проведенням ряду простих перетворень рівняння МакГі–фон Хіппеля для некооперативного та кооперативного зв'язування зводяться до виразів, що містять змінну c_b:

$$K\cdot\left(c-c_b\right)\cdot\left(N-nc_b\right)\cdot\left(\frac{N-nc_b}{N-\left(n-1\right)c_b}\right)^{n-1}-c_b=0 \tag{4}$$

$$K\cdot\left(c-c_b\right)\cdot\left(N-nc_b\right)\cdot\left(\frac{\left(2\omega-1\right)\left(N-nc_b\right)+c_b-R'}{2\left(\omega-1\right)\left(N-nc_b\right)}\right)^{n-1}\cdot\left(\frac{N-\left(n+1\right)c_b+R'}{2\left(N-nc_b\right)}\right)^{2}-c_b=0$$

$$R'=\sqrt{\left(N-\left(n+1\right)c_b\right)^2+4\omega c_b\left(N-nc_b\right)} \tag{5}$$

Ці рівняння були реалізовані в програмі і розв'язані чисельно. Це дозволило працювати з концентрацією c_b як з функцією $c_b = c_b(N,c; K,n)$.

Два типи місць зв'язування. У цьому випадку процеси зв'язування описуються за допомогою системи рівнянь, яка повинна брати до уваги, чи є процеси зв'язування лігандів, які займають одне місце зв'язування (тобто пари основ і фосфати), взаємозалежними чи ні. Якщо параметр *N* позначає концентрацію пар основ ДНК, то 2*N* місць зв'язування відповідає за перший тип зв'язування (з фосфатом) і *N* місць зв'язування – за другий тип (інтеркаляція).

Для наших експериментальних даних найкращі результати апроксимації були отримані з використанням системи модифікованих рівнянь Скетчарда (для зовнішнього зв'язування) і МакГі-фон Хіппеля (для інтеркаляції). Система описує два незалежні процеси зв'язування лігандів, що займають одне місце зв'язування. Інтеркаляція в інтервал між пари основ можлива лише при умові, що обидва фосфати не зв'язані з лігандом і навпаки, тобто зв'язування з фосфатами можливе лише тоді, якщо жоден ліганд не інтеркалював у відповідний інтервал. На додачу, процес прямого переходу зв'язаного ліганду з місця першого типу до місця другого типу є неможливим і повинно бути не менше ніж *n*-1 вільних інтервалів між двома лігандами, що інтеркалювали. Ця модель приводить до наступної системи рівнянь:

$$\begin{cases} c_b^{(1)}=K_1\left(c-c_b^{(1)}-c_b^{(2)}\right)\cdot\left(2N-c_b^{(1)}\right)\cdot\left(1-\dfrac{c_b^{(2)}}{N}\right) \\ c_b^{(2)}=K_2\left(c-c_b^{(1)}-c_b^{(2)}\right)\cdot\left(N-nc_b^{(2)}\right)\cdot\left(\dfrac{N-nc_b^{(2)}}{N-\left(n-1\right)c_b^{(2)}}\right)^{n-1}\cdot\left(1-\dfrac{c_b^{(1)}}{2N}\right)^{2} \end{cases}, \tag{6}$$

де $c_b^{(1)}$ і $c_b^{(2)}$ – концентрації лігандів, зв'язаних з місцями першого і другого типу, K_1 і K_2 – константи зв'язування для зовнішнього зв'язування та інтеркаляції відповідно. Важливо, що додатковий множник виникає в рівняннях для незалежних процесів; були і деякі важливі обмеження [1]. Крім того, у програмі було враховано фактор pH розчину (тобто вміст йонів H^+); це дало можливість точніше визначати кількість зовнішніх місць зв'язування (не лише 2*N*). Загалом, рівняння мають кілька розв'язків, проте, лише один з них задовольняє необхідним обмеженням у робочому діапазоні параметрів.

Детальніше про модифіковані рівняння зв'язування див. [1].

4. Експериментальні результати

Взаємодія малих лігандів з ДНК супроводжується у спектрах поглинання та флюоресценції явищем гіпохромізму смуг поглинання, червоним та блакитним зсувами максимумів смуг поглинання та флюоресценції відповідно, а також зміною квантового виходу ФЛ. Ці та інші прояви взаємодії EtBr та АО з ДНК спостерігались в оптичних спектрах.

Параметри зв'язування. Параметри зв'язування EtBr та АО з ДНК було визначено за спектрами флюоресценції. Для опису процесів зв'язування найбільш коректною виявилась система (6) рівнянь Скетчарда та МакГі-фон Хіппеля. Параметри зв'язування для порівняння були взяті з інших робіт, де вони були отримані також для ДНК *calf thymus*.

Бромистий етидій. Спектр ФЛ водного розчину EtBr містить одну смугу з максимумом на 614 нм. В присутності ДНК інтенсивність ФЛ EtBr зростає більш ніж у 10 разів з ростом концентрації ДНК у розчині. Спостерігався блакитний зсув до 14 нм (рис. 2а). Криві зв'язування (залежність I_{max} від P/D) представлені на рис. 2б.

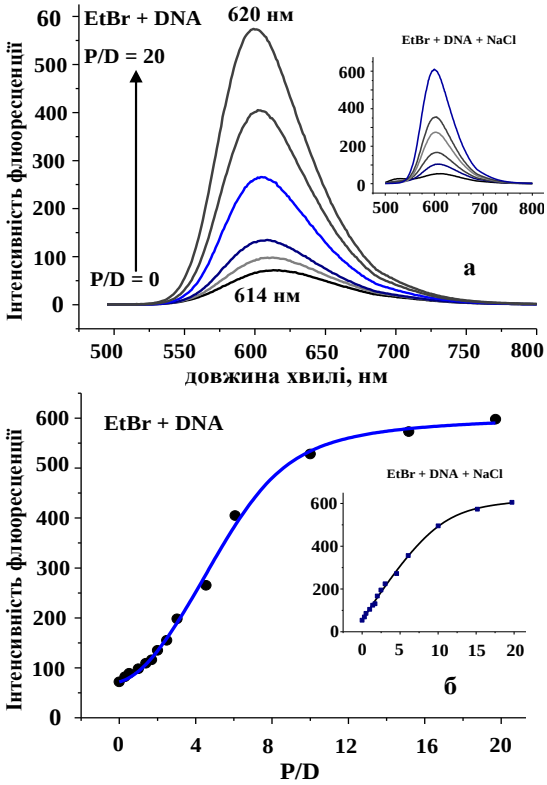


Рис. 2. Спектр флюоресценції (a) та криві зв'язування (b) бромистого етидію (c_{EtBr} = 6.6 mkM, c_{NaCl} = 0.1 M).

Крива зв'язування EtBr з ДНК має s-подібну форму в області малих P/D. Така форма може бути результатом присутності у розчині іншого типу лігандів. Останніми можуть бути йони H^+ або агрегати бромистого етидію. З додаванням NaCl до розчину s-подібна форма кривої зв'язування зникає, ймовірно за рахунок виключення з процесу зв'язування іншого типу лігандів. Монотонне зростання кривої зв'язування означає, що бромистий етидій лише інтеркалює, а із зовнішніми фосфатними групами практично не зв'язується.

На основі експериментальних даних було обчислено параметри зв'язування. Для опису процесу зв'язування було використано систему взаємозалежних рівнянь Скетчарда та МакГі-фон Хіппеля. Отримані значення: $K_1 = (7.4 \pm 1.5)\cdot 10^2$ M^{-1}, $K_2 = (1.2 \pm 0.3)\cdot 10^5$ M^{-1}, $n = 5.7 \pm 1.1$ (два типи зв'язування); $K_2 = (3{,}8 \pm 0.9)\ 10^6$ M^{-1}, $n = 6.6 \pm 1.2$ (один тип зв'язування).

Для порівняння, у роботі [2] значення константи зв'язування для інтеркаляції $K = 1.5\cdot 10^5$ M^{-1} (без NaCl) і $K = 3\cdot 10^6$ M^{-1} (з NaCl) були отримані на основі аналізу рівняння Скетчарда, і добре співпадають з нашими результатами. У [8] за допомогою методів УФ–спектроскопії було отримано значення $K = 6.58\cdot 10^4$ M^{-1}.

Акридиновий оранжевий. Спектри флюоресценції водного розчину АО+ДНК при різних P/D представлені на рис. 3а. Спектр має одну смугу з максимумом на 528 нм. При додаванні ДНК до розчину спостерігався незначний блакитний зсув (~2 нм).

області малих P/D інтенсивність ФЛ змінювалась немонотонно (рис. 3 б): крива зв'язування мала мінімум при P/D ~ 0.5. Така ж поведінка спостерігалась і для сангвінарину [9]. Зменшення інтенсивності ФЛ в області малих P/D вказує на інший (зовнішній) механізм зв'язування АО та ДНК. Це означає, що АО зв'язується з ДНК двома способами – зовнішнім зв'язуванням та інтеркаляцією. У присутності NaCl (0.1 M) залежність інтенсивності ФЛ від P/D не має мінімуму: NaCl виключає зовнішні місця зв'язування.

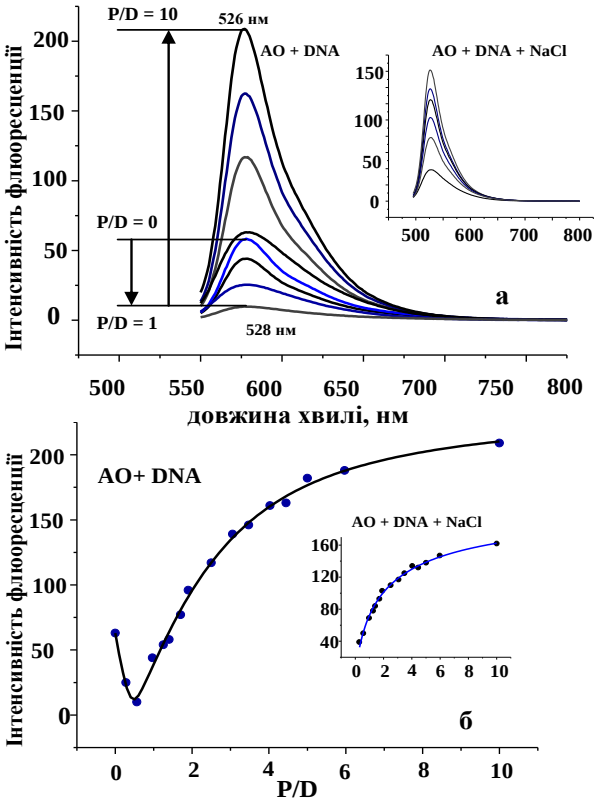


Рис. 3. Спектри флюоресценції (а) та криві зв'язування (б) акридинового оранжевого (c_{EtBr} = 6.6 mkM, c_{NaCl} = 0.1 M)

Варто зауважити, що в роботі [4] було зроблено якісне пояснення різних процесів зв'язування, і ці пояснення аналогічні до наших, наданих пізніше для сангвінарину [1]. Крім того, у [4] константи зв'язування були визначені для випадків без/з NaCl з використанням координат Скетчарда, і константи для інтеркаляції добре співпадають з нашими результатами, отриманими за допомогою системи рівнянь Скетчарда та МакГі–фонХіппеля.

K_1 = (3.0 ±1.0) 10^5 M^{-1}, K_2 = (1.8 ±0.2) 10^6 M^{-1}, n = 3.2 ±0.3 (два типи зв'язування, без NaCl); K_2 = (1.4 ±0.1) 10^5 M^{-1}, n = 3.4 ±1.1 (один тип зв'язування, з NaCl).

Результати [4]: K_2 = 2 10^6 M^{-1}, n~2.5 (два типи зв'язування, без NaCl); K_2 = 1.3 10^5 M^{-1}, n~2 (один тип зв'язування, з NaCl). Для порівняння, у [8] з даних УФ-спектроскопії було отримане значення $K = 2.7 \cdot 10^4$ M^{-1}.

Спектри поляризованої флюоресценції. Здатність до переорієнтації дипольного моменту молекули у нев'язких розчинах при поглинанні та випромінюванні світла може слугувати зручним параметром для опису зв'язування, а саме рівня фіксації молекули на матриці ДНК.

Вільний барвник має мінімальний ступінь анізотропії, оскільки найбільш схильний до броунівських ротацій. При взаємодії з ДНК алкалоїд втрачає здатність здійснювати броунівські ротації, тому ступінь анізотропії повинен зростати. Для найбільш довгохвильової смуги поглинання та смуги флюоресценції, тобто при початковій паралельній орієнтації дипольних моментів поглинання та флюоресценції, максимальним значенням ступеня анізотропії може бути r = 0.4, що означає практично повну фіксацію молекули на матриці ДНК.

Бромистий етидій. Як випливає з обчислень параметрів зв'язування, EtBr взаємодіє з молекулою ДНК лише способом інтеркаляції, а в зв'язуванні зовнішнього типу участі не бере. У вільному стані ступінь анізотропії рівний нулю, що і було отримано для розчину з P/D = 0. При додаванні ДНК, ступінь анізотропії зростає зі збільшенням P/D.

Ступінь анізотропії спектру флюоресценції є сталим на всьому проміжку довжин хвиль і показує ступінь фіксації молекули на матриці ДНК, бо основні причини деполяризації молекули пов'язані саме зі здатністю до руху (броунівських ротацій). Залежність ступеня анізотропії EtBr від P/D подано на рис. 4.

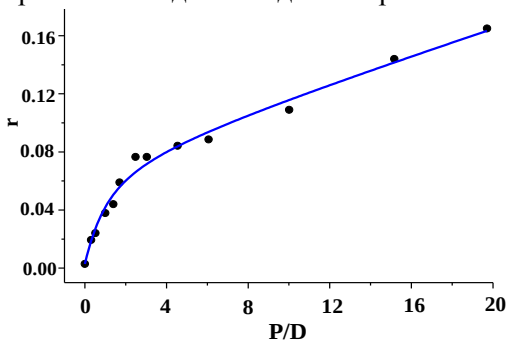


Рис. 4. Залежність ступеня анізотропії розчину бромистого етидію та ДНК від P/D.

З рисунка видно, що для даного барвника ступінь анізотропії зростає при збільшенні концентрації ДНК у розчині. Оскільки для EtBr домінуючим є зв'язування за інтеркаляційним механізмом, то при збільшенні P/D все більша кількість молекул інтеркалює, а, отже, міцніше фіксується на матриці ДНК, що і є причиною монотонного зростання ступеня анізотропії.

Акридиновий оранжевий. Для цього барвника при малих P/D характерним є зовнішній тип зв'язування, при більших – домінує інтеркаляція. Оскільки рухливість молекули барвника зменшується незалежно від способу фіксації на матриці ДНК, то ступінь анізотропії

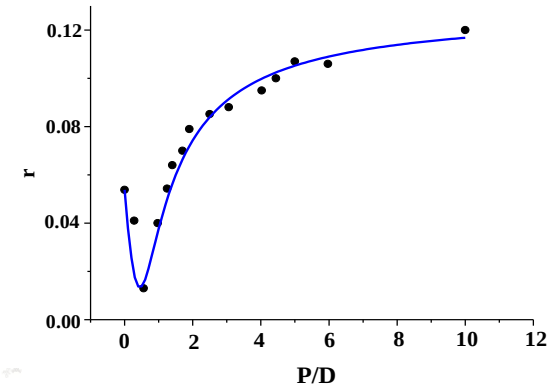


Рис. 5. Залежність ступеня анізотропії розчину АО та ДНК від P/D.

мав би монотонно зростати. Проте, як виявилось, при P/D ~ 1.5 крива має мінімум (рис. 5). Однією з причин такої залежності може бути багатокомпонентність суміші (агрегати з різною енергетичною структурою, зокрема, димери), іншою - те, що при малих P/D зв'язування з ДНК міняє початкову орієнтацію дипольних моментів переходу при поглинанні та флюоресценції для АО.

Помітний вихід на насичення залежності r (P/D) свідчить про те, що вже при P/D = 10 більшість молекул акридинового оранжевого фіксуються на матриці ДНК.

5. Висновки

Методами оптичної спектроскопії водних розчинів бромистого етидію та акридинового оранжевого встановлено способи зв'язування та обчислено параметри зв'язування барвників з ДНК.

Визначено, що для досліджених зразків, в залежності від структури молекули, характерні різні типи зв'язування: для акридинового оранжевого – інтеркаляція та зовнішнє зв'язування; для бромистого етидію – лише інтеркаляція. Крива зв'язування для акридину має мінімум при малих P/D. Крива зв'язування для бромистого етидію при малих P/D має s-подібну

форму, що може бути спричинено присутністю іонів H^+ або агрегатів барвника. Присутність NaCl виключає зовнішні місця зв'язування для акридину і прибирає s-подібність кривої зв'язування для етидію. Дотепер діапазон малих значень P/D практично не досліджений; вказані ефекти (зовнішнє зв'язування для АО та s-подібність кривої для EtBr) зафіксовано вперше.

Комп'ютерна програма для апроксимації експериментальних результатів та рівняння зв'язування були вдосконалені додаванням параметрів для врахування pH розчину, що дало змогу підвищити точність визначення параметрів зв'язування.

Як результат узагальнення результатів цієї та інших наших робіт [1,9], можна зробити висновок про вплив форми ліганду на криву зв'язування. Якщо молекули ліганду плоскі, вони інтеркалюють «більш повно»; відповідно, реалізуються два механізми зв'язування – зовнішнє та інтеркаляція. Якщо частина ліганду знаходиться не в площині молекули, то ця частина, як правило, розміщується в малій борозенці, і тим самим виключає зовнішні місця зв'язування. Відповідно, реалізується єдиний механізм зв'язування – інтеркаляція.

Список використаних джерел

1. *Gumeniuk V.* Binding Parameters of Alkaloids Berberine and Sanguinarine with DNA / V. Gumeniuk, N. Bashmakova, S. Kutovyy, V. Yashchuk, L. Zaika // Ukr. J. Phys. – 2011. – **56**. – P.524-533.
2. *Houssier C.* Interaction of Ethidium Bromide with DNA. Optical and Electrooptical Study / C. Houssier, B. Hardy, E. Fredericq // Biorolymers – 1974. – **13**. – P.1141-1160.
3. *Urbanova J.* Fluorescence properties of selected benzo[c]phenantridine alkaloids and studies of their interaction with CT DNA / J. Urbanova, P. Lubal, I. Slaninova, E. Taborska, P. Taborsky // Anal. Bioanal. Chem.–2009. – **394**. – p.997-1002.
4. *Fredericq E.* Study of the Interaction of DNA and Acridine Orange by Various Optical Methods / E. Fredericq, C. Houssier // Biopolymers. –- 1972. – **11**. – P.2281-2308.
5. *Motulsky H.* Analyzing Binding Data / H. Motulsky, R. Neubig // Curr. Protoc. Neurosci. [Online],DOI:10.1002/0471142301.ns0705s52, 65p. Available: http://www.onlinelibrary.wiley.com
6. *Scatchard G.* The attractions of proteins for small molecules and ions / G. Scatchard // Ann. N.Y. Acad. Sci. – 1949. – **51**. – P.660-672.
7. *McGhee J.D.* Theoretical aspects of DNA-Protein interactions: co-operative and non-co-operative binding of large ligands to a one-dimensional homogeneous lattice / J. D. McGhee, P. H von Hippel // J. Mol. Biol. – 1974. – **86**. – P.469-489.
8. *Nafisi S.* Stability and structural features of DNA intercalation with ethidium bromide, acridine orange and methylene blue. / S. Nafisi, A. A. Saboury, N. Keramat, J.-F. Neault, H.-A. Tajmir-Riahi // J. Mol. Struct. – 2007.– **827**, P.35–43.
9. *Кутовий С. Ю.* Параметри зв'язування алкалоїду сангвінарину з ДНК /С.Ю.Кутовий, Р.С.Савчук, Н. В. Башмакова // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Сер. Фіз.-мат. науки. – 2014, №3.

References

1. GUMENIUK, V., BASHMAKOVA, N., KUTOVYY, S. et al. (2011) Binding Parameters of Alkaloids Berberine and Sanguinarine with DNA. *Ukr. J. Phys*. 56. p.524-533.
2. HOUSSIER, C., HARDY, B., FREDERICQ, E. (1974) Interaction of Ethidium Bromide with DNA. Optical and Electrooptical Study. *Biopolymers*, *13*, 1141-1160.
3. URBANOVA, J., LUBAL, P., SLANINOVA, I. et al. (2009) Fluorescence properties of selected benzo-[c]phenantridine alkaloids and studies of their interaction with CT DNA. *Anal. Bioanal. Chem.* 394, p.997-1002.
4. FREDERICQ, E. and HOUSSIER, C. (1972) Study of the Interaction of DNA and Acridine Orange by Various Optical Methods. *Biopolymers*, 11, 2281-2308.
5. MOTULSKY, H., NEUBIG, R. (2010) Analyzing Binding Data. *Curr. Protoc. Neurosci*. [Online], DOI: 10.1002/0471142301. ns0705s52, 65 pages. Available:http://www.onlinelibrary.wiley.com
6. SCATCHARD, G. The attractions of proteins for small molecules and ions. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 51. p.660-672.
7. MCGHEE, J. and VON HIPPEL, P. (1974) Theoretical aspects of DNA-Protein interactions: co-operative and non-co-operative binding of large ligands to a one-dimensional homogeneous lattice. *J. Mol. Biol.* 86. p.469-489.
8. NAFISI, S., SABOURY, A. A., KERAMAT, N., et al. (2007) Stability and structural features of DNA intercalation with ethidium bromide, acridine orange and methylene blue. *J. Mol. Struct.*, 827, p.35–43.
9. KUTOVYY, S., SAVCHUK, R., BASHMAKOVA, N. (2014) Binding parameters of sanguinarine to DNA. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series Physics and Mathematics*, No.3 (this issue).

Надійшла до редколегії 22.05.2014

УДК 543.423:574.23

Пророк В. В.[1], к.ф.-м.н., с.н.с.,
Вайт Ф. Дж.[2], PhD., проф.,
Даценко О. І.[3], к.ф.-м.н., с.н.с.,
Булавін Л. А.[4], д.ф.-м.н., проф.,
Мельниченко Л. Ю.[5], к.ф.-м.н., с.н.с.,
Поперенко Л. В.[6], д.ф.-м.н., проф.

Канали надходження калію та цезію-137 до редису у природних умовах при недостатній вологості грунту

[1,3,4,5,6] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13, e-mail: [1]prorok@univ.kiev.ua
[2] The James Hutton Institute, Invergowrie, Dundee DD2 5DA, Scotland (UK)

V. V. Prorok[1], PhD, Sen. Sci. Res.,
P. J. White[2], PhD, Prof.,
O. I. Dacenko[3], PhD, Sen. Sci. Res.,
L. A. Bulavin[4], Dr. Sci., Prof.,
L. Yu. Melnychenko[5], PhD, Sen. Sci. Res.,
L. V. Poperenko[6], Dr. Sci., Prof.

Mechanisms of potassium and cesium-137 uptake by radish in the field under water-stressed conditions

[1,3,4,5,6] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13, e-mail: [1]prorok@univ.kiev.ua
[2] The James Hutton Institute, Invergowrie, Dundee DD2 5DA, Scotland (UK)

Вивчалися канали надходження калію та ^{137}Cs у рослини на прикладі редису. Показано, що при концентрації розчиненого калію у ґрунті C_K > 2 - 4 мкг/см^3 надходження калію та цезію до рослини, як правило, відбувається по низькоселективних калієвих каналах. При 0,5 мкг/см^3 < C_K < 2-4 мкг/см^3 калій переходить у рослину також і по високоселективному калієвому каналу. При C_K < 0,5 мкг/см^3 рослина починає використовувати ще один високоселективний калієвий канал.
Ключові слова :йонні канали,калій, цезій-137, ґрунтовий розчин

The mechanisms of potassium (K) and cesium (^{137}Cs) uptake by plants were studied using radish as an example. The investigations were performed at three experimental field sites within the 10 km Zone of the Chornobyl Nuclear Power Plant in 2012 and 2013. Radish seeds were sown, and plants and their corresponding soil solutions were sampled, several times during each growing season. The value $r = (^{137}Cs/K)_p/(^{137}Cs/K)_{ss}$ was estimated for each paired sample. Here, $(^{137}Cs/K)_p$ is the quotient of ^{137}Cs and K concentrations in the plant and $(^{137}Cs/K)_{ss}$ is the same for the corresponding soil solution. It was observed that potassium and cesium entered plant roots, as a rule, through a complement of transporters with low selectivity when the concentration of dissolved potassium (C_K) in the soil solution was greater than 2 to 4 μg/cm^3. In this case the value of r was near 1. However, when C_K was between 0.5 and 2 to 4 μg/cm^3, potassium also appeared to enter plant roots through highly-selective potassium transporters, whilst cesium entered roots only through the transporters with low selectivity. In this case the value of r was much less than 1. When C_K was less than 0.5 μg/cm^3, cesium appeared to enter roots through a complement of transporters with greater selectivity for cesium than potassium. The value of r in this case could exceed 1.
Key words: ion channels, potassium, cesium-137, soil solution

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

У роботах [1,2] показано, що концентрація ^{137}Cs у рослинах даного виду, що виросли на тій самій забрудненій ^{137}Cs ділянці, але при різних погодних умовах, може інколи відрізнятися у десятки разів. Ці результати доводять, що нема однозначного зв'язку між концентрацією ^{137}Cs у рослині та характеристиками ґрунту, на якому виросла ця рослина. Причиною вказаної різниці є зміна параметрів ґрунтового розчину при зміні погодних умов. ^{137}Cs та елементи макроживлення рослин у залежності від параметрів ґрунтового розчину, властивостей рослини та інших причин можуть надходити до рослини по різних каналах – або по низькоселективних, або по високоселективних, або по тих чи інших каналах одночасно з різним вкладом кожного каналу. Багато дослідників (див., наприклад оглядові роботи [3,4]), намагаються пов'язати надходження цезію до рослини з надходженням

© В.В. Пророк, Ф.Дж. Вайт, О.І. Даценко, Л.А. Булавін, Л.Ю. Мельниченко, Л.В. Поперенко, 2014

калію до неї. На сьогоднішній день вже ніхто не ставить під сумнів існування щонайменше двох систем (каналів) надходження калію до рослин – low affinity (низькоспоріднена) та high affinity (високоспоріднена). Як правило, надходження калію до рослини відбувається по низькоспорідненому (неселективному) та високоспорідненому (селективному) каналам одночасно. Вважається, що низькоспоріднений канал (канали) переважає при високій концентрації калію у грунтовому розчині (вищій за 12-39 мкг/см^3), а високоспоріднений при низькій (меншій за 12-39 мкг/см^3) [3,4].

У роботі [5] описані кілька типів мембранних неселективних катіонних каналів. Це канали, що активуються деполяризацією, гіперполяризацією, іонами Ca^{2+}, механічною напругою та канали, що нечутливі до електричної напруги.

Згідно з [6], Cs може попадати до рослини через вхідні калієві канали, через нечутливі до електричної напруги катіонні канали, через H^+-насоси, через кальцієві канали. Може виходити у грунт через коріння рослини через вихідні калієві канали. У реальних умовах більша частина Cs попадає з ґрунту до клітин кореня через нечутливі до електричної напруги неселективні катіонні канали.

Погляди різних дослідників щодо каналів надходження цезію до рослини інколи не узгоджуються. На жаль, більшість наведених вище результатів – це результати експериментів з інтактними рослинами. А тому не можна ці результати механічно переносити на рослини, що виростають у природних умовах. У роботах [7,8] після аналізу експериментальних результатів, що отримані в природних умовах, показано, що добуток концентрації K у ґрунтовому розчині на вміст вологи h у одиниці об'єму ґрунту $C_K = K \cdot h$ набагато точніше вказує на момент початку домінування того чи іншого каналу, ніж концентрація калію у ґрунтовому розчині. При концентрації розчиненого калію у ґрунті $C_K > 2$-4 мкг/см^3 концентраційні коефіцієнти рослина / грунтовий розчин для калію й для цезію є величинами одного порядку. При концентрації розчиненого калію у ґрунті $C_K < 2$ мкг/см^3 концентраційний коефіцієнт рослина / грунтовий розчин для калію стає більшим, ніж для цезію – інколи у 40-50 разів. Як правило, $C_K < 2$ мкг/см^3 при значній недостачі вологи у грунті. Вміст цезію у рослинах при цьому стає значно меншим, ніж у випадку $C_K > 2$-4 мкг/см^3. Надходження цезію залишається пропорційним концентрації розчиненого у ґрунті цезію. Цезій надходить до рослини по тому ж самому низькоселективному каналу (каналах), у той час як для забезпечення себе калієм рослина у цьому випадку використовує також і інший – високоселективний канал.

Мета цієї роботи – більш ретельно дослідити надходження цезію та калію до рослин у природних умовах при нестачі вологи у грунті.

Результати досліджень та їх обговорення

Дослідження проводилися на трьох експериментальних ділянках, розташованих у 10-кілометровій зоні відчуження Чорнобильської АЕС: ділянка Д – торф'яний ґрунт; ділянка Б – піщаний ґрунт; Б2 – піщаний ґрунт із дещо відмінним від грунту Б складом. Вміст цезію-137 у досліджуваних грунтах складав: Д – 15 200 Бк/кг, Б – 16 900 Бк/кг, Б2 – 10 600 Бк/кг. Гама-фон на експериментальних ділянках дорівнював: Д – 200 мР/год., Б – 380 мР/год., Б2 – 350 мР/год. Густина грунту Д – 0,85 г/см^3, грунту Б – 1,41 г/см^3, грунту Б2 – 1,42 г/см^3.

Для дослідження надходження цезію та калію з ґрунту до рослин ми висівали на цих експериментальних ділянках насіння редису як швидковиростаючої рослини. Насіння висівалося по декілька разів кожного вегетативного сезону 2012 та 2013 років. Досліджувалися зразки рослин та відповідного грунтового розчину. Ми відбирали зразки рослин та грунтів по кілька разів кожного сезону. Але ми не відбирали паростків, вони продовжували рости далі. Рослини відбиралися до стадії їх цвітіння. Потім всі ці рослини висушувалися. З ґрунту екстрагувався ґрунтовий розчин за допомогою центрифуги ОС-6М. Частота обертання вала приводу складала до 6000 обертів на хвилину. Центрифугований розчин фільтрувався крізь паперовий фільтр (діаметр пор 1-3 мкм), а потім крізь мембранний фільтр (діаметр пор 0,1 мкм). Грунтовий розчин після фільтрування був прозорим. Для консервації цього розчину ми додавали у нього концентровану азотну кислоту у пропорції 1 мл кислоти на 500 мл грунтового розчину та нагрівали його до кипіння. Ми визначали вологість грунту h як відношення маси води у зразку до маси сухого грунту в цьому зразку з експериментальною похибкою 10%. Концентрація ^{137}Cs у зразках визначалася за допомогою гама-спектрометра з напівпровідниковим детектором HPGe ORTEC GMX40P4-83-RB POPTOP з експериментальною похибкою 10%. Концентрація калію у зразках вимірювалася атомно-абсорбційним методом на спектро-

фотометрі С-115-М1 при довжині хвилі $\lambda = 766{,}5$ нм із похибкою 5%. Для всіх досліджуваних зразків рослин визначалася величина $r = (^{137}Cs/K)_p/(^{137}Cs/K)_{ss}$, де $(^{137}Cs/K)_p$ – відношення концентрації ^{137}Cs та K у рослині, $(^{137}Cs/K)_{ss}$ – відношення концентрації ^{137}Cs та K у відповідному ґрунтовому розчині Легко показати, що величина r є також відношенням концентраційних коефіцієнтів рослина / ґрунтовий розчин для цезію та калію.

На рис. 1. – рис. 3 приведені отримані експериментальні результати для величин r та C_K для ділянок Д, Б та Б2.

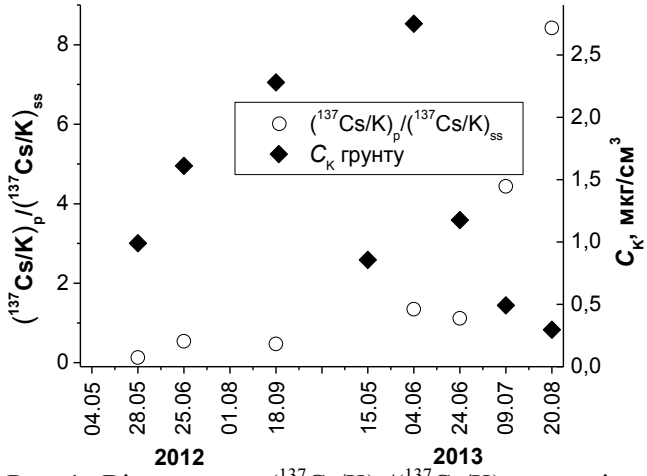


Рис. 1. Відношення $(^{137}Cs/K)_p/(^{137}Cs/K)_{ss}$ та вміст розчиненого K у грунті для ділянки Д

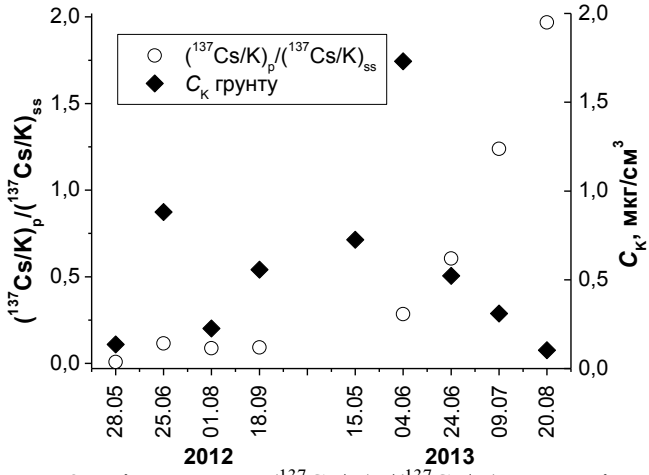


Рис. 2. Відношення $(^{137}Cs/K)_p/(^{137}Cs/K)_{ss}$ та вміст розчиненого K у грунті для ділянки Б

Як уже зазначалося, існує кілька каналів надходження калію та цезію до рослин [3,4]. Ми не можемо їх однозначно ідентифікувати за результатами наших досліджень. Але можна встановити, який канал надходження калію – високоселективний чи низькоселективний – переважає у кожному конкретному випадку. З отриманих нами експериментальних результатів можна побачити, що для усіх досліджуваних ґрунтів та рослин при концентрації розчиненого калію у ґрунті (добуток концентрації K у ґрунтовому розчині на вміст вологи у одиниці об'єму ґрунту) $C_K > 2 - 4$ мкг/см^3 величина r змінюється не більше, ніж у кілька разів, тобто концентраційні коефіцієнти рослина / ґрунтовий розчин для цезію та калію приблизно рівні. Таким чином, при концентрації розчиненого калію у ґрунті $C_K > 2 - 4$ мкг/см^3 надходження калію та цезію до рослини, як правило, відбувається по низькоселективним каналам. Це підтверджує висновки [7,8].

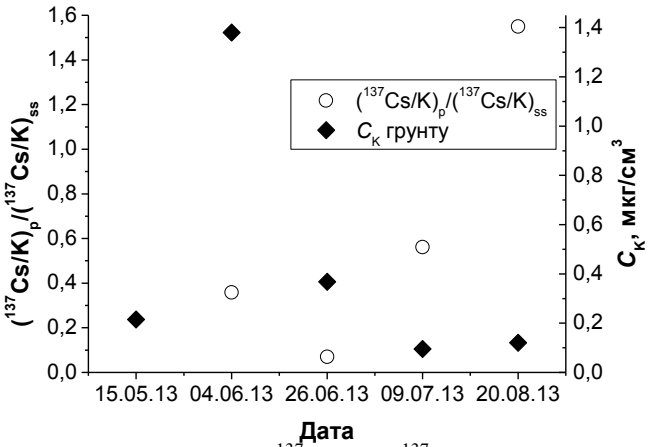


Рис. 3. Відношення $(^{137}Cs/K)_p/(^{137}Cs/K)_{ss}$ та вміст розчиненого K у грунті для ділянки Б2

При концентрації розчиненого калію у ґрунті 0,5 мкг/см^3 < C_K < 2 – 4 мкг/см^3 величина r зменшується – концентраційний коефіцієнт рослина / грунтовий розчин для калію стає набагато більшим, ніж для цезію. Концентрація цезію у рослинах при цьому стає у багато разів меншою. Надходження цезію залишається приблизно пропорційним концентрації розчиненого у ґрунті цезію (добутку концентрації цезію у грунтовому розчині та вмісту грунтового розчину в одиниці об'єму грунту). Калій переходить у рослину також і по високоселективному каналу. Це також підтверджує висновки [7,8].

Але, як це можна побачити з рис.1-3, при C_K < 0,5 мкг/см^3 величина r знову починає інтенсивно зростати й може значно перевищувати 1. Вміст цезію в рослинах теж стає набагато більшим, ніж у попередньому випадку. Ми вважаємо, що в умовах, коли C_K < 0,5 мкг/см^3, рослина починає використовувати ще один високоселективний канал. Надходження цезію до рослини по цьому

каналу перевищує надходження калію. Тому вміст цезію в рослині збільшується.

Висновки

При концентрації розчиненого калію у ґрунті $C_K > 2$ - 4 мкг/см^3 надходження калію та цезію до рослини, як правило, відбувається по низькоселективних калієвих каналах. Величина *r* при цьому близька до одиниці.

При концентрації розчиненого калію у ґрунті 0,5 мкг/см^3 < C_K < 2-4 мкг/см^3 калій переходить у рослину також і по високоселективному калієвому каналу. Цезій у цьому випадку переходить в рослину тільки по низькоселективному каналу. Величина *r* при цьому набагато менша за одиницю.

При концентрації розчиненого калію у ґрунті $C_K < 0,5$ мкг/см^3 рослина починає використовувати ще один високоселективний калієвий канал. Надходження цезію до рослини по цьому каналу є доволі значним. Величина *r* при цьому може перевищувати одиницю.

Робота виконана за фінансової підтримки Українського Науково-Технологічного Центру (проект УНТЦ 5439).

Список використаних джерел

1. *Пророк В.В.* Залежність вмісту ^{137}Cs у рослині від параметрів ґрунту / В.В. Пророк, К.Ф.В. Масон, С.Ф. Тімофєєв та ін. // Вісник Київського ун-ту, сер. фіз.-мат., 2004. – Вип. 3. – С. 407-416.
2. *Prorok V.V.* The transfer of dissolved ^{137}Cs from soil to plants [Електронний ресурс] / V.V. Prorok, C.F.V. Mason, V.A. Ageyev, et al. // Proc. of WM'06. Session 66. Tucson (Arizona), 26 February – 2 March 2006. – Tucson, 2006. – Режим доступу: WM06/66.html
3. *Maathuis F.J.M.* Mechanisms of potassium absorption by higher plant roots / F.J.M. Maathuis and D. Sanders // Physiol. Plant. – 1996. – Vol.96, No 1. – P.158-168.
4. *Maathuis F.J.M.* Roles of High Plant K^+ Channels / F.J.M. Maathuis, A.M. Ichida, D. Sanders et.al. // Plant Physiol. – 1997. – Vol. 114, No 4. – P.1141-1149.
5. *Demidchik V.* Nonselective Cation Channels in Plants / V. Demidchik, R.J. Davenport and M. Tester // Annu. Rev. Plant Biol. – 2002, Vol. 53, No 1. – P. 67-107.
6. *White P.J.* Mechanisms of caesium uptake by plants / P.J. White and M.R. Broadley // New Phytol. – 2000. – Vol. 147, No 2. – P. 241-256.
7. *Пророк В.В.* Механізми надходження калію та цезію до рослини / В.В. Пророк // Вісник Київського ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки. – 2007. – Вип.4. – С. 365-368.
8. *Булавін Л.А.* Фактори, що визначають концентрацію ^{137}Cs у рослині на забрудненому ґрунті у природних умовах / Л.А. Булавін, В.В. Пророк, Л.В. Поперенко // Доповіді НАН України. – 2011. – №1. – С. 173-177

References

1. PROROK, V. et al. (2004) Dependence of ^{137}Cs content in the plant on the soil parameters. *Bullet. Univ. Kyiv. Ser.: Phys. & Math.* (3). p. 407-416.
2. PROROK, V. et al. (2006) The transfer of dissolved ^{137}Cs from soil to plants. In *Proc. of WM'06. Session 66*., 26th February to 2nd March 2006 [Online]. Tucson. – Available from: WM06/66.html
3. MAATHUIS, F. and SANDERS, D. (1996) Mechanisms of potassium absorption by higher plant roots. *Physiol. Plant.* 96 (1). p.158-168.
4. MAATHUIS, F. et al. (1997) Roles of High Plant K^+ Channels. *Plant Physiol.* 114 (4). P.1141-1149.
5. DEMIDCHIK, V., DAVENPORT, R. and TESTER, M. (2002) Nonselective Cation Channels in Plants. *Annu. Rev. Plant Biol.* 53 (1). p.67-107.
6. WHITE, P. and BROADLEY, M. (2000) Mechanisms of caesium uptake by plants. *New Phytol*. 147 (2), p.241-256.
7. PROROK, V. (2007) Mechanisms of potassium and caesium uptake by plants. *Bullet. Univ. Kyiv. Ser.: Phys. & Math.* (4). p.365-368.
8. BULAVIN, L. PROROK, V. and POPERENKO, L. (2011) Factors defining ^{137}Cs concentration in the plant at polluted land under natural conditions *Reports of NAS of Ukraine.* (1). p.173-177.

Надійшла до редколегії 21.06.14 р.

УДК 538.9

Храпатий С. В.[1], к.ф.-м.н., доц.,
Махлайчук В. М.[2], к.ф.-м.н., н.с.

Визначення ступеню димеризації водяної пари за допомогою спектроскопічного методу

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 036800, м. Київ, пр.-т. Глушкова, 2, e-mail: khrapatiysv@ukr.net
[2]Одеський національний університет імені І. І. Мечникова, 65082, м. Одеса, вул. Пастера, 42 e-mail: interaktiv@ukr.net

S. V. Khrapatiy[1], PhD, Ass. Prof.,
V. M. Makhlaichuk[2], PhD, Sci. Res.

Determination of the degree of dimerization of water vapor according to the spectroscopic data

[1]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st. 2,
e-mail: khrapatiysv@ukr.net
[2]Odessa I. I. Mechnikov National University, 65028, 42 Pastera st., Odessa
e-mail: interaktiv@ukr.net

Робота присвячена визначенню константи рівноваги димеризації молекул насиченої водяної пари шляхом аналізу спектрів поглинання інфрачервоного випромінювання. Знайдені значення константи рівноваги димеризації молекул водяної пари узгоджуються з літературними даними, отриманими іншими авторами.

Ключові слова: димер, мономер, насичена водяна пара.

The work is devoted to the determination of the dimerization constant for the overheated water vapor on the basis of the known infrared absorption spectra.

It is demonstrated that the absorption coefficient of monomer is modelled by its value for sufficiently rarefied water vapour. With the increased density the interaction as between monomers and between monomers and dimers becomes significant. Besides, with the increasing density, there is a change in the absorption coefficient of the monomer, which is caused primarily by dipole-dipole interaction.

The energy of dipole-dipole interaction exceeds the Van der Waals energy of interactions between water molecules an order of magnitude value. At the same time, a dimensionless factor appears negligible.

We have shown that with the pressures up to 135 atm the dependence of the absorption coefficient of water monomer on pressure is insignificant.

The comparison of the obtained values of dimerization constant to the existing experimental data of different authors shows good agreement.

Key Words: dimer, monomer, overheated water vapor.

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л. А.

Вступ

В [1] обговорюються спектри поглинання перегрітої водяної пари при температурі 598-673 К, та різних тисках в спектральній області 3200 – 4000 $см^{-1}$, яка відповідає симетричним та антисиметричним коливанням ν_1 и ν_3 ОН-зв'язку молекули води. Для цих коливань встановлені енергії та інтенсивності відповідних ліній. Існує база даних [2], в якій зібрані частоти коливань та інтенсивності спектральних ліній для мономерів води. Зрозуміло, що димерізація молекул води призводить до змін у спектрах їх поглинання. Дійсно, якщо дві молекули води утворили між собою водневий зв'язок, тоді частоти основних коливань ν_1 і ν_3 мономера зсуваються у червону область і з'являються додаткові обертони. Таким чином, досліджуючи спектри поглинання можна визначити ступінь димеризації водяної пари.

В [1] передбачається, що мономери і димери молекул води знаходяться в стані хімічної рівноваги. Моделювання спектрів поглинання вимагає рішення задачі про ангармонічні коливання ОН-зв'язку. Потенціальна енергія задається за допомогою потенціалу Морзе, силові константи визначаються шляхом розв'язку зворотної спектроскопічної задачі для експериментальних значень коливальних переходів в мономері [2] та димері [3-5]. В [1] наведені експери-

© С.В. Храпатий, В.М. Махлайчук, 2014

ментальні та розраховані спектри поглинання мономерів та мономерів в димері при температурі 673 К та різних тисках, та визначено константу рівноваги утворювання димерів молекул води (табл. 1).

Таблиця 1

Значення константи димеризації

T	K_p (T)
К	атм$^{-1}$
598	0.00228
623	0.00229
650	0.0025
653	0.00173
673	0.0017

Зазначимо, що розрахований спектр поглинання мономерів молекул води залежить від тиску. Таке поглинання, дійсно, виникає внаслідок диполь-дипольної взаємодії між мономерами.

Як буде показано далі, при T = 673 К та тиску від 29 до 135 атм [1], вплив диполь-дипольної взаємодії на картину ІЧ-поглинання у парі води є незначним.

Основною ідеєю цієї роботи є відмова від припущення, зробленого в [1], що коефіцієнт поглинання мономера води залежить від густини або тиску.

Розрахунок ступеню димеризації

Проаналізуємо дані авторів [1], враховуючи нечутливість спектрів поглинання мономерів до тиску. Для даних рис.2 роботи [1], для визначення внеску димерів у спектр поглинання, віднімемо від повного поглинання мономерів внесок при найбільш низькому тиску (29,23 атм).

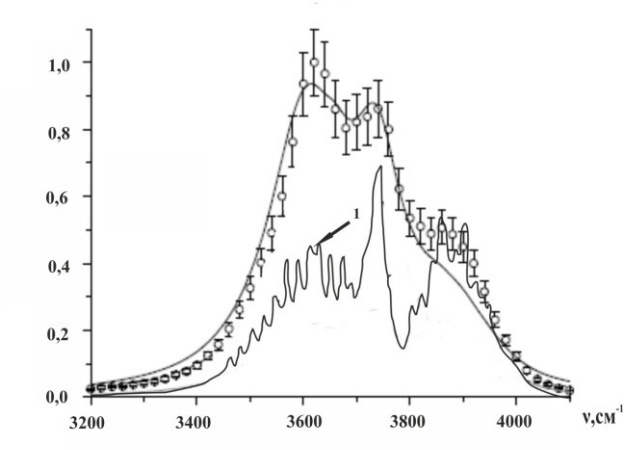


Рис. 1. Нормалізовані спектри поглинання мономерів та мономерів в димері при температурі 673 К та тиску 135,5 атм. Світлі кружки – експеримент, 1- мономерне поглинання при низькому тиску.

На рис. 1 чорна суцільна лінія відповідає поглинанню мономерами при низькому тиску. Повна інтегральна інтенсивність поглинання відповідає співвідношенню:

$$I = I_m + I_d = n_m\sigma_m + n_d\sigma_d \qquad (1)$$

де $n_m, n_d, \sigma_m, \sigma_d$ - чисельна густина частинок і переріз поглинання мономерів і димерів відповідно. Повна чисельна густина молекул води $n_0 = N_w / V$ зв'язана з густиною n_m мономерів та n_d димерів води співвідношеннями:

$$c_m = n_m / n_0, \quad c_d = 2n_d / n_0, \qquad (2)$$

за умови нормування:

$$c_m + c_d = 1. \qquad (3)$$

Інтенсивності ІЧ-поглинання представимо у вигляді:

$$I = I_m\left(1 + \frac{I_d}{I_m}\right) = n_0\sigma_m\left(1 + c_d\left[\frac{\sigma_d}{2\sigma_m} - 1\right]\right), \qquad (4)$$

в якому

$$\frac{I_d}{I_m} = c_d\left[\frac{\sigma_d}{2\sigma_m} - 1\right] \equiv c_d \cdot \varepsilon, \qquad (5)$$

є відношення парціальних інтенсивностей,

$$\varepsilon = \frac{\int_{\nu_L}^{\nu_U}\sigma_d(\nu)d\nu}{2\int_{\nu_L}^{\nu_U}\sigma_m(\nu)d\nu} - 1, \qquad (6)$$

є часткою надлишкового поглинання ізольованим димером води. Цю величину слід вважати постійною, оскільки переріз поглинання не залежіть від частоти у вказаній спектральній області [6].

Чисельні розрахунки, проведені з аналізу рис.1 показують, що при тиску пари 135,5 атм:

$$I_d / I_m \approx 0.77.$$

На відміну від цього, аналогічна величина в роботі [1] дорівнює:

$$\left(I_d / I_m\right)^{(V)} \approx 2.28.$$

Закон діючих мас поєднує між собою концентрацію димерів c_d і константу димеризації $K_p(T)$ співвідношенням:

$$c_d \approx 2n_0 TK_p(T). \qquad (7)$$

Звідки

$$K_p^{(V)}(T)/K_p(T) \approx c_d^{(V)}/c_d \approx$$
$$\approx \left(I_d/I_m\right)^{(V)}/\left(I_d/I_m\right) \approx 2{,}96.$$

Ішими словами, значення $K_p(T)$, вказане в таблиці 1 при температурі 673 К слід зменшити майже в три рази, тобто константа димеризації молекул води набуває значення $K_p(T) \approx 0{,}0006(атм^{-1})$.

Таке значення відповідає даним, отриманими авторами [7-11].

Результати та обговорення

Коефіцієнт поглинання мономера моделюється його значенням для достатньо розрідженої водяної пари. При збільшені густини стає істотною взаємодія як між мономерами води, так і між мономерами та димерами. Тому зі збільшенням густини, дійсно, природно очікувати певну зміну коефіцієнта поглинання мономера. Ця зміна зумовлена, насамперед, диполь-дипольною взаємодією. За порядком величин енергія диполь-дипольної взаємодії між мономерами визначається співвідношенням:

$$< U_{dd} > \sim \frac{(d^2)^2}{k_B T \sigma_m^6} \cdot (n\sigma_m^3)^2,$$

де $n\sigma_m^3$ - безрозмірна густина, $\sigma_m = 2r_m$, $r_m = 1{,}58$ Å - радіус мономера води.

Енергія диполь-дипольної взаємодії $\frac{(d^2)^2}{k_B T \sigma_m^6}$ приблизно на порядок перевищує енергію Ван-дер-Ваальсової взаємодії між молекулами води.

У той же час безрозмірний множник $(n\sigma_m^3)^2$ виявляється незначним (див. відповідні значення в табл. 2). Тому, вплив оточення на характер поглинання мономерів і димерів води в розглянутій в [1] області тисків водяної пари є дуже малим.

Кореговані значення [1] узгоджуються з даними роботи [7], в якій з'ясовано, що при визначені константи димеризації відповідно значенням другого віріального коефіцієнту рівняння стану принциповим є врахування міжмолекулярної взаємодії мономер-мономер, мономер-димер та димер-димер.

Ці значення повністю відповідають екстрапольованим в область високих температур значенням $K_p(T)$ з робіт [8-10], які були розраховані за допомогою методів квантової хімії та в яких враховувались «справжні» димери (стан димерів з енергіями меншими енергії дисоціації димера D_0), а також зі значеннями [11]. Дані про константу димеризації, отримані різними авторами, наведені в табл. 3.

Таблиця 2

Значення параметра $((n\sigma_m^3)^2$ та середньої відстані a між молекулами у водяній парі, згідно [1]

P	$(n\sigma_m^3)^2$	a
атм		Å
29.23	0.00011	14.5
74.4	0.00089	10.2
135.5	0.00352	8.1

Таблиця 3

Порівняння значень $K_p(T)$ різних авторів при Т = 650 К

	[7]	[8]	[9]	[10]	[11]	Кореговані значення [1]
$K_p(T)$ $атм^{-1}$	$0.5*10^{-3}$	$0.3*10^{-3}$	$0.3*10^{-3}$	$0.5*10^{-3}$	$0.8*10^{-3}$	$0.6*10^{-3}$

Висновки

В роботі проведено розрахунок константи димеризації насиченої водяної пари на основі спектроскопічних даних.

Шляхом аналізу спектрів поглинання показано, що при тиску до 135,5 атм., залежністю поглинання мономера молекули води від густини можна знехтувати. Таке припущення свідчить про необхідність корегування значень $K_p(T)$ в [1], що призведе до узгодження отриманих значень з даними різних авторів.

Автори висловлюють щиру подяку проф. М.П.Маломужу за плідні обговорення.

Список використаних джерел

1. Density evolution of absorption bandshapes in the water vapor OH-stretching fundamental and overtone: evidence for molecular aggregation / A.A.Vigasin, A.I. Pavlyuchko, Y. Jin, Y. Ikawa. // Journal of Molecular Structure. – 2005. – №742. – С. 173–181.
2. The HITRAN molecular database: Editions of 1991 and 1992 / L.S. Rothman, R.R. Gamache, R.H. Tipping та ін.]. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 1992. – №48. – С.469–507.
3. Swanton D.J. An ab initio SCF calculation of the dipole-moment derivatives and infrared-absorption intensities of the water-dimer molecule. / Swanton D.J., Backskay G.B., Hush N.S. // Chem. Phys. – 1983. – №82. – С. 303-315.
4. Chin S. Prediction of the vibrational spectra of interacting water molecules / S. Chin, T. A. Ford, W. B. Person. // J. Mol. Struct.. – 1984. – №113. – С. 341–358.
5. Interpretation of infrared intensity changes on molecular complex formation. I. Water dimer./ ZILLES B.A., PERSON W.B. // J. Chem. Phys. – 1983. – №79. – С. 65-77.
6. Chylek P. Water vapor dimers and atmospheric absorption of electromagnetic radiation./ Chylek P.,Geldart D.J.V. // Geophysical Research Letters. – 1997. – № 24(16). – С. 2015-2018.
7. Маломуж Н.П. Константа равновесия димеризации молекул воды в насыщенном водном паре. / Маломуж Н.П.,Махлайчук В.Н., Храпатый С.В. // Журнал Физической Химии. – 2014. – №88(7-8). – С. 1108–1113.
8. Shillings A.J.L. An upper limit for water dimer absorption in the 750nm spectral region and a revised water line list./ Shillings A.J.L.,Ball S.M., Barber M.J. та ін.]. // Atmos. Chem. Phys. – 2011. – № 11. – С. 4273-4287.
9. Scribano Y. Water Dimers in the Atmosphere III: Equilibrium Constant from a Flexible Potential. / Scribano Y., Goldman N.,Saykally R.J., Leforestier C. // J. Phys. Chem. A. – 2006. – №110. – С. 5411–5419.
10. Scribano Y. Contribution of water dimer absorbtion to the millimeter and far infrared atmospheric water continuum. / Scribano Y., Leforestier C. // J. Chem. Phys. – 2007. – №126. – С. 234301–1 –234301.
11. Tretyakov M. Yu. Some consequences of high temperature water vapor spectroscopy: Water dimer at equilibrium. / Tretyakov M. Yu, Makarov D.S. // J. Chem. Phys. – 2011. – №134. – С. 084306–1 – 084306–9.

References

1. VIGASIN A.A., PAVLYUCHKO A.I., JIN Y., IKAWA S. (2005) Density evolution of absorption bandshapes in the water vapor OH-stretching fundamental and overtone: evidence for molecular aggregation. *Journal of Molecular Structure*. 742. p. 173–181.
2. ROTHMAN L.S., GAMACHE R.R., TIPPING R.H., RINSLAND C.P., SMITH M.A.H., BENNER D.C., DEVI V.M., FLAUD J.-M., CAMY-PEYRET C., PERRIN A., GOLDMAN A., MASSIE S.T., BROWN L.R. (1992) The HITRAN molecular database: Editions of 1991 and 1992. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 48. p. 469-507.
3. SWANTON D.J., BACKSKAY G.B., HUSH N.S. (1983) An ab initio SCF calculation of the dipole-moment derivatives and infrared-absorption intensities of the water-dimer molecule. *Chem. Phys*.82. p. 303-315.
4. CHIN S., FORD T.A., PERSON W.B. (1984) Prediction of the vibrational spectra of interacting water molecules. *J. Mol. Struct.* 113. p. 341-358.
5. ZILLES B.A., PERSON W.B. (1983) Interpretation of infrared intensity changes on molecular complex formation. I. Water dimer. *J. Chem. Phys*. 79. p. 65-77.
6. CHYLEK P., GELDART D.J.W. (1997) Water vapor dimers and atmospheric absorption of electromagnetic radiation. *Geophysical Research Letters*. 24(16). p. 2015-2018.
7. MALOMUZH N.P., MAKHLAICHUK P.V., KHRAPATYI S.V. (2014) Water Dimer Equilibrium Constant of Saturated Vapor. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 88(7-8). p. 1108-1113.
8. SHILLINGS A. J. L., BALL S. M., BARBER M. J., TENNYSON J., JONES R. L. (2011) An upper limit for water dimer absorption in the 750 nm spectral region and a revised water line list. *Atmos. Chem. Phys*. № 11. p. 4273-4287.
9. SCRIBANO Y., GOLDMAN N., SAYKALLY R.J., LEFORESTIER C. (2006) Water Dimers in the Atmosphere III: Equilibrium Constant from a Flexible Potential. *J. Phys.Chem.A*. 110. p. 5411-5419.
10. SCRIBANO Y., LEFORESTIER C. (2007) Contribution of water dimer absorbtion to the millimeter and far infrared atmospheric water continuum. *J. Chem. Phys*.126. p. 234301-1 - 234301-12.
11. TRETYAKOV M. YU., MAKAROV D.S. (2011) Some consequences of high temperature water vapor spectroscopy: Water dimer at equilibrium. *J. Chem. Phys.* 134. p.084306-1 - 084306-9.

Надійшла до редколегії 08.08.14

УДК 535.375.5: 621.373.826

Ящук В.П.[1], к.ф.-м.н., доц.,
Комишан О.О.[1], асп,
Сиромятников В.Г.[1], д.х.н., проф.,
Ольховик Л.А.[1], інж.

Вимушене комбінаційне розсіяння суміші барвників пірометена 597 і родаміна 6Ж у везикулярних полімерних плівках

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13, e-mail: yavas@univ.kiev.ua

V.P. Yashchuk[1], PhD,
O.O. Komyshan[1], PhD stud.,
V.G. Syromiatnikov[1], Dr.Sci., Prof.,
L.A. Olkhovyk[1], Eng.

Stimulated Raman scattering of pyrromethene 597 and rhodamine 6G mixture in vesicular polimeric films

[1]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: yavas@univ.kiev.ua

Досліджено вимушене комбінаційне розсіяння (ВКР) суміші лазерних барвників пірометену 597 та родаміну 6Ж в везикулярних полімерних плівках. Показано, що із-за близькості їх спектрів поглинання і люмінесценції при інтенсивному збудженні другою гармонікою YAG-Nd^{3+} виникає ВКР обох барвників, яке стимулюється їх хаотичною генерацією (ХГ). Випромінювання ВКР містить всі стоксові лінії барвників, що попадають в межі спектра ХГ.

Внесок кожного з барвників у випромінювання ВКР та ХГ визначається їх відносною концентрацією. При збільшенні концентрації одного з барвників спектр ХГ зсувається в довгохвильову сторону, послідовно ініціюючи всі стоксові лінії барвників в його межах.

При переважній концентрації одного барвника домінує його власна ХГ, яка стимулює не тільки власне ВКР, але й ВКР іншого барвника. Це може бути використано для розширення діапазону спостереження ліній ВКР останнього барвника при використанні його в суміші з першим барвником.

Ключові слова: Багатократне розсіяння світла, хаотична генерація, вимушене комбінаційне розсіяння, везикулярні плівки, органічні барвники.

Stimulated Raman scattering (SRS) of pyrromethene 597 and rhodamine 6G mixture in vesicular polimeric films is investigated. It is shown that their absorption and luminescence spectra coincide. Thus under intense excitation by the second harmonic of YAG-Nd^{3+} both dyes SRS occurs, which is stimulated by their random lasing (RL). SRS radiation contains all Stokes lines of the dyes which are observed within the range of the RL spectrum.

The contribution of each of the dyes in SRS and RL radiation is determined by their relative concentration. With one of dyes concentration increasing the RL spectrum shifts to long-wavelength direction sequentially initiating all Stokes lines of dyes within it.

In the vast concentration of one dye its own RL dominates, which stimulates not only own SRS, but also other dye SRS. This can be used to extend the range of SRS lines observation of the last one dye when it is used in a mixture with the first dye.

Key Words: Multiple light scattering, random lasing, stimulated Raman scattering, vesicular films, dyes.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Вступ

В багаторазово розсіювальних седовищах (БРС) при високих інтенсивностях (≥ 0.1 МВт/мм^2) збудження виникає вимушене комбінаційне розсіяння світла (ВКР) органічних лазерних барвників, яке протікає одночасно з їх хаотичною генерацією (ХГ) [1, 2]. Разом вони створюють спарений ефект ВКР-ХГ, в якому випромінювання ХГ відіграє стимулюючу роль для ВКР. Це випромінювання, разом із зовнішнім лазерним збудженням, створює двокомпонентну накачку, яка збуджує вимушені коливання молекул барвника на частотах, стоксові лінії яких попадають в межі спектра ХГ. В результаті цього на всіх цих лініях виникає ВКР. Спектр випромінювання барвників стає квазілінійчатим, в якому на фоні суцільної складової, зумовленої

© Ящук В.П., Комишан О.О., Сиромятников В.Г., Ольховик Л.А., 2014

ХГ, спостерігаються стоксові ВКР, що відповідають ділянці спектра комбінаційного розсіяння в межах спектра ХГ. Це дає можливість отримувати спектри комбінаційного розсіяння світла (КРС) лазерних барвників за їхніми спектрами ВКР-ХГ в БРС [2]. Це розширює можливості спектроскопії КРС барвників, сильно ускладненої їх люмінесценцією, що спонукає використовувати більш складні методики [3-5].

Завдяки спареності ВКР та ХГ ділянка спектра КРС обмежена шириною спектра ХГ та можливостями його зміщення. В певних межах це зміщення може бути досягнуто зміною параметрів зразка БРС та інтенсивності накачування [6]. Однак, як показано в [7], діапазон реєстрації спектра КРС досліджуваного (розсіювального) барвника можна розширити, використовуючи додатковий (генеруючий) барвник, підібраний таким чином, щоб його спектр ХГ попав у потрібну ділянку спектра КРС досліджуваного барвника.

В [7] ця ідея була реалізована на парі барвників, підібраній так, щоб ХГ виникала лише в генеруючому барвнику, а ХГ розсіювального барвника була придушена. Це спрощувало інтерпретацію результатів, що було важливо для перевірки ідеї розширення. Однак для практичного застосування це непринципово, оскільки важливим є лише зміщення спектра ХГ в потрібний спектральний діапазон, а не належність випромінювання ХГ до певного барвника. Крім того, ця вимога ускладнює застосування методики, оскільки передбачає пошук певних комбінацій барвників.

В даній роботі проведені дослідження для більш загального випадку, коли ХГ мають можливість проявляти обидва барвники.

Зразки та методика експерименту

Для досліджень були вибрана пара барвників пірометен 597 (Pm597) та родамін 6Ж (R6G), які мають практично ідентичні спектри поглинання та люмінесценції (рис. 1) і, отже, мають однакові можливості для ХГ. Єдиною необхідною вимогою до барвників із наведених в [6] була можливість їх одночасного збудження. Барвники вводились в полімерні везикулярні плівки разом (двокомпонентні пліки) і поодинці (однокомпонентні плівки). Метод отримання та параметри плівок ідентичні наведеним в [7].

Виміри проводилися при температурі 77 К, при якій умови прояву ліній ВКР в спектрах ВКР-ХГ покращуються. Барвники в плівках збуджувались сфокусованим пучком ($d \approx 0.8$ мм) другої гармоніки лазера YAG-Nd^{3+} з модуляцією

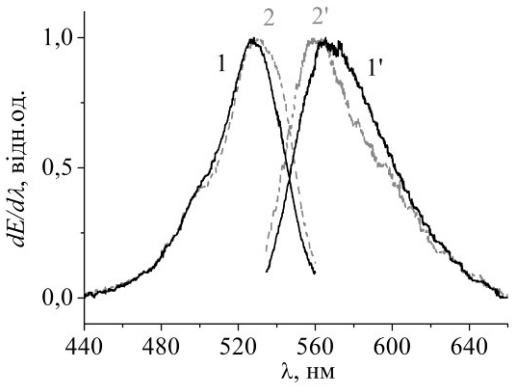


Рис.1. Спектри поглинання (1, 2) і люмінесценції (1′, 2′) родаміну 6Ж (1, 1′) і пірометену 597 (2, 2′) в полімерній плівці.

добротності ($\tau = 15$нс). Інтенсивність збудження змінювалася в межах $1 \div 100$ МВт/см^2 нейтрально-сірими фільтрами. Спектри ВКР-ХГ реєструвалися за один імпульс дифракційним спектрографом з CMOS матрицею із спектральним розділенням 0.3 нм і записувались в файл. Розділення спектрів на суцільну і лінійчату складову здійснювалось за допомогою спеціалізованої програми «Digitizer». Спектри КРС знаходились із спектрів ВКР-ХГ за методикою [2].

Експериментальні результати та їх аналіз

На рис. 2 і рис. 3 наведені залежності спектрів випромінювання ВКР-ХГ двокомпонентних везикулярних плівок Pm597/R6G від концентрації одного із барвників при сталій концентрації іншого барвника.

Як видно із рис. 2, при збільшенні концентрації пірометена C_{Pm597} і сталій концентрації родаміна C_{R6G} спектр ВКР-ХГ розширюється і зміщується в довгохвильову область, що зумовлено посиленням ефекту перепоглинання випромінювання ХГ та наступного перевипромінювання в стоксову сторону, типового для барвників [6, 7]. Зміщення відбувається, починаючи з позиції, близької до спектра ВКР-ХГ однокомпонентної плівки R6G при концентрації 2 ммоль/л, тобто до спектра двокомпонентної плівки, в якій $C_{Pm597} \to 0$. Закінчується це зміщення на позиції, близькій до спектра ВКР-ХГ однокомпонентної плівки Pm597, тобто до спектра двокомпонентної плівки, в якій $C_{R6G} \to 0$.

Із цього витікає, що ХГ двокомпонентної плівки обумовлено випромінювання обох барвників, внески яких залежать від їх відносної концентрації у плівці. При малій концентрації C_{Pm597} ХГ обумовлено в основному R6G, при

великій - Pm597. При цьому спектр двокомпонентної плівки Pm597/R6G з концентраціями C_{Pm597}/C_{R6G} = 5/2 ммоль/л додатково зсунутий в довгохвильову область відносно спектра однокомпонентної плівки R6G, що обумовлено збільшенням ефекту перепоглинання/перевипромінювання через більшу сумарну концентрацію барвників в двокомпонентній плівці.

Аналогічні трансформації спектра ВКР-ХГ спостерігаються і зі збільшенням C_{R6G} при C_{Pm597} = const (рис. 3): спектр також зсувається в довгохвильову сторону через зростання перепоглинання/перевипромінювання. Причому вплив концентрації R6G більший порівняно з Pm597, оскільки в родаміна менший стоксовий зсув між спектрами люмінесценції та поглинання (рис. 1), що посилює цей ефект, який залежить від ширини області перекриття цих спектрів.

Таким чином, відносною концентрацією барвників можна змінювати внески випромінювання ХГ окремих барвників в загальне випромінювання ХГ двокомпонентної плівки, а загальною концентрацією – зміщувати спектр ХГ по спектральній осі.

Із порівняння лінійчатої структури спектрів ВКР-ХГ двокомпонентних плівок (криві 2-4) із спектром комбінаційного розсіяння R6G (крива 5) на рис. 2, видно, що в них проявляються лінії КРС останнього. Причому при збільшенні C_{Pm597} в спектрі ВКР-ХГ

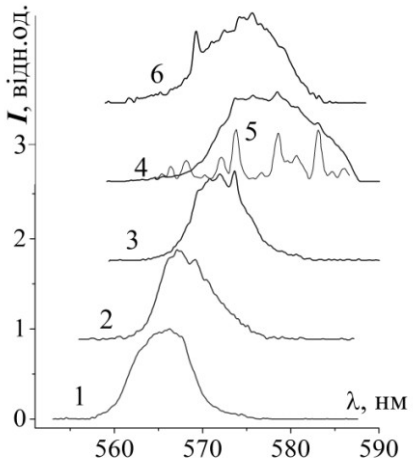


Рис. 2. Спектри ВКР-ХГ двокомпонентних везикулярних плівок Pm597/R6G в залежності від концентрації Pm597: 1.25/2 (2), 2.5/2 (3), 5/2 (4) ммоль/л при інтенсивності накачування 0,85 МВт/мм^2; 5– спектр комбінаційного розсіяння R6G, побудований по даних SERRS [4]; 1, 6 – спектри ВКР-ХГ однокомпонентних везикулярних плівок R6G (1) і Pm597 (6) з концентрацією барвників 2 і 5 ммоль/л відповідно.

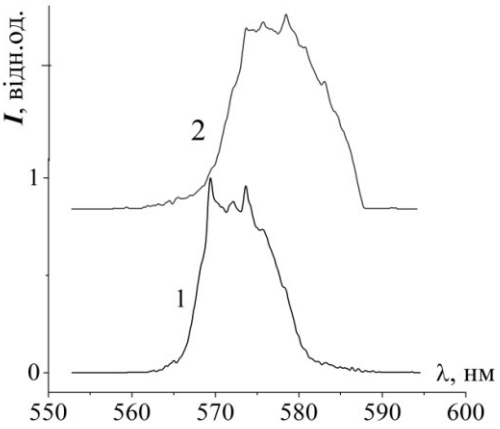


Рис. 3. Спектри випромінювання двокомпонентної везикулярної плівки Pm597/R6g в залежності від концентрації R6G: 1/5 (1), 2/5 (2) ммоль/л при інтенсивності накачування 0,85 МВт/мм^2.

з'являються нові стоксові лінії R6G, які не спостерігалися в однокомпонентній плівці R6G. Оскільки, при C_{Pm597}>C_{R6G} ХГ двокомпонентної плівки зумовлена Pm597, то це означає, що ВКР родаміна 6Ж ініціюється ХГ пірометена 597. Тобто лінії КРС R6G, які не проявлялися в спектрі ВКР-ХГ однокомпонентної плівки C_{R6G} = 2ммоль/л, чітко проявляються в спектрі ВКР-ХГ двокомпонентної плівки Pm597/R6G за рахунок ХГ додатково введеного барвника Pm597.

На рис. 4 наведені спектри КРС, отримані із спектрів ВКР-ХГ однокомпонентних Pm597 (1), R6G (2) і двокомпонентних Pm597/R6G (3, 4) везикулярних плівок. Видно, що в спектрах КРС двокомпонентних плівок з концентраціями $C_{Pm597} > C_{R6G}$ проявляються всі стоксові лінії R6G в межах відповідних спектрів ХГ (виділені пунктирами, що з'єднують спектри 2 і 3). Тобто, якщо в цій парі барвників R6G вважати досліджуваним барвником, а Pm597 – додатковим, то введення останнього дозволяє спостерігати всі стоксові лінії досліджуваного барвника.

Крім ліній досліджуваного барвника в спектрі КРС двокомпонентної лінії проявляються також і лінії додаткового (Pm597) барвника (виділені пунктирами, що з'єднують спектри 1 і 3). При практичному застосуванні методики ці спектри невідомі, в зв'язку з чим виникає потреба розділення спектрів КРС окремих барвників в спектрі двокомпонентної плівки. Це вирішується за допомогою спектрів КРС двокомпонентних плівок з різними відносними концентраціями барвників: із спектрів 3 і 4 видно, що інтенсивність характерної для Pm597 лінії λ = 569,5 нм відносно решти ліній, що належать R6G, залежить від C_{Pm597}/C_{R6G}.

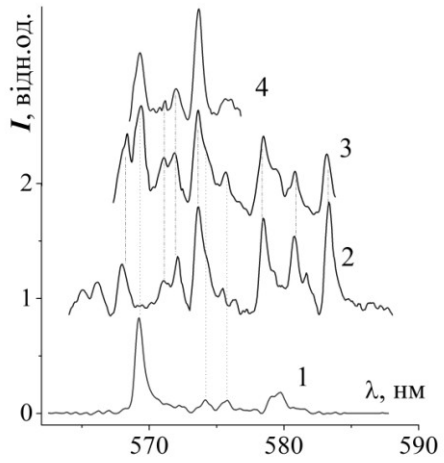


Рис. 4. Спектри КРС, отримані із спектрів ВКР-ХГ везикулярних однокомпонентних Pm597 (1) R6G (2) і двокомпонентних Pm597/R6G (3, 4) плівок з концентрацією барвників:
5/2 ммоль/л (3) і 2.5/2 ммоль/л (4).

Висновки

Показано, що в везикулярних плівках при збудженні суміші лазерних барвників пірометена 597 і родаміна 6Ж, що мають близькі спектри поглинання та люмінесценції, виникає вимушене комбінаційне розсіяння світла обох барвників, яке стимулюється їх хаотичною генерацією. Це Співвідношення між внесками барвників у випромінювання ХГ і ВКР залежить від їх відносної концентрації. При переважній концентрації одного з барвників домінує його ХГ, яка стимулює не тільки власне ВКР, але й ВКР іншого барвника.

Стимулювання ВКР одного барвника хаотичною генерацією іншого барвника може бути використане як метод розширення діапазону реєстрації спектра КРС першого по їх випромінюванню в багатократно розсіювальних середовищах при інтенсивному збудженні.

Список використаних джерел

1. *Яцук В.П.* Влияние вынужденного комбинационного рассеяния на формирование спектра хаотической генерации органических красителей/ В.П. Яцук, Е.А. Тихонов, О.А. Пригодюк // Письма в ЖЭТФ. – 2010. – 91,№ 4. – с.186 – 189.
2. *Yashchuk V.P.* Stimulated Raman scattering of dyes under random lasing in polymeric vesicular films/ V.P. Yashchuk, E.A. Tikhonov, O.A. Prygodiuk// Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2011. – 535. – с.156 – 166.
3. *Herrmann J.* Transverse excitedstimulated resonance Raman scattering/ J. Herrmann, B. Wilhelmi//Optics communications – 1976. – 19, №3. – с.420-422.
4. *Meixner A.J.* Nanoscale surface enhanced resonance Raman scattering spectroscopy of single molecules on isolated silver clusters/ A.J. Meixner, T. Vosgrone, M. Sackrow // Journal of Luminescence. – 2001. - 94-95. – с.147.
5. *Центер М.Я.* Спектры резонансного спонтанного комбинационного рассеяния (РСКР) криптоцианина в кристаллическом и адсорбированном состояниях / М.Я. Центер, Я.С. Бобович, Н.М. Белявская // Оптика и спектроскопия. – 1973. – 34,№1. - с.82.
6. *Яцук В.П.* Влияние перепоглощения и переизлучения на ВКР в полиметиновых красителях в многократно рассеивающих средах/ В.П. Яцук, А.О. Комышан, О.А. Пригодюк, А.А. Ищенко, Л.А. Ольховик// Квант. электроника. – 2013. – 43,№ 12. – с.1127-1131.
7. *Яцук В.П.* Використання вторинного випромінювання суміші барвників для визначення спектрів їх комбінаційного розсіяння/ В.П. Яцук, О.О. Комишан // Вісник КНУ імені Т.Шевченка, серія фіз.-мат.наук– 2014. – 1 – с.309-312.

References

1. YASHCHUK, V., TIKHONOV, E. and PRYGODIUK, O. (2010) Effect of stimulated Raman scattering on the formation of the random lasing spectrum of dyes *JETP Letters*. **91(**4), p.174 – 177.
2. YASHCHUK, V., TIKHONOV, E. and PRYGODIUK, O. (2011) Stimulated Raman scattering of dyes under random lasing in polymeric vesicular films *Mol. Cryst. Liq. Cryst*, 535, p.156 – 166.
3. HERRMANN, J., WILHELMI, B. (1976) Transverse excitedstimulated resonance Raman scattering *Optics communications*, 19(3), p.420.
4. MEIXNER, A., VOSGRONE, T., SACKROW, M. (2001) Nanoscale surface enhanced resonance Raman scattering spectroscopy of single molecules on isolated silver clusters. *Journal of Luminescence*, 94-95, p.147.
5. *CENTER, M., BOBOVICH, Y., BELYAVSKAYA, N.* (1973) Resonance spontaneous Raman scattering spectra (RSRS) of cryptocyanine in crystalline and adsorbed states *Optics and Spectroscopy*, 34 (1), p.82.
6. YASHCHUK, V. et al. (2013) Influence of reabsorption and reemission on stimulated Raman scattering of polymethine dyes in multiple scattering media. *Quantum electronics.* 43(12), p.1127-1131.
7. YASHCHUK, V. et al. (2014) The secondary radiation of dye mixture using to determine their Raman spectra. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series Physics & Mathematics,* (1), p.309-312.

Надійшла до редколегії 13.08.14

УДК 519.9

Ящук В.М.[1], проф
Терентьєва Ю.Г.[1], к.ф.-м.н., доц..
Штонь І.О.[2] пров. інж.,
Коваль Ю.В.[1] асист.
Сніцерова О.М.[1], студ.
Гамалія М.Ф. [2], проф.

Особливості УФ-спектрів поглинання лімфоцитів

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13, [1]e-mail: juliaTer@i.ua

[2]Інститут експериментальної патології, онкології і радіобіології ім. Р.Е. Кавецького НАН України, 03022, м. Київ, вул. Васильківська, 45

V. M. Yashchuk[1], Prof
Y.G. Terent'yeva[1], PhD
I.O. Shton[2], lead. Eng,
Ju. V. Koval[1], ass. Prof
O.M. Snitserova[1], stud.
M.F. Gamaliya [2], Prof.

Some peculiarities of the lymphocytes UV-absorption spectra

[1]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
[1]e-mail: juliaTer@i.ua

[2]R.E. Kavetsky Institute of Experimental Pathology, Oncology and Radiobiology NAS of Ukraine, 03022 Kyiv, 45 Vasylkivska St.,

Вперше виміряні спектри оптичного поглинання лейкоцитарної маси здорової людини та лейкоцитарної маси від хворих на В-клітинний хронічний лімфолейкоз (В-ХЛЛ). Проаналізовано спектральний прояв окремих біологічних компонент (білків, нуклеїнових кислот, коферментів), що входять до складу лейкоцитів і впливають на інтегральну форму спектру в обох випадках. Серед проаналізованих вище біохімічних речовин короткохвильовий максимум при 215 нм має тільки РНК. Близьке до нього значення короткохвильового максимуму спектру поглинання мають білок і коензими – 212 нм та ДНК – 208 нм. Встановлено, що спектри лейкоцитарної маси від здорових донорів та хворих істотно відрізняються. Головний внесок у спектр поглинання лейкоцитарної маси у хворих на В-ХЛЛ вносить рибонуклеїнова кислота (РНК). Факт наявності вказаної відмінності може в перспективі виявитись корисним в якості додаткового показника для встановлення діагнозу В-ХЛЛ.

Ключові слова: спектр поглинання, лімфоцит, РНК, В-клітинний хронічний лімфолейкоз

For the first time the optical absorption spectra of leukocytes from healthy humans and from patients with B-cell chronic lymphocytic leukemia (B-CLL) were measured. Spectral manifestations of individual biological components (proteins, nucleic acids, nucleotides) that are constitutive parts of the white blood cells and affect the integral form of the spectrum are analyzed. Among the analyzed above biochemical substances shortwave maximum at 215 nm has only RNA. Close to the maximum value to shortwave absorption spectrum with protein and coenzyme - 212 nm and DNA - 208 nm. The spectra of leukocytes from healthy donors and patients differ significantly. The main contribution to absorption spectra of the leukocyte mass from patients with B-CLL makes ribonucleic acid (RNA). According to results of the research, a presumable cause of established differences in UV absorption spectra of leukocytes from healthy persons and patients with B-CLL is in the latters of large quantities RNA. The presence of these differences could potentially be useful as an additional indicator for the diagnosis of B-CLL.

Key Words: absorption spectrum, lymphocytes, RNA, B-cell chronic lymphocytic leukemia.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

1. Вступ

Спектроскопічні методи мають ряд переваг перед іншими методами медико-біологічного аналізу, а саме: неінвазивність, швидкість, наочність, відсутність потреби у дорогих хімічних реагентах [1].

© В.М.Ящук, Ю.Г. Терентьєва, І.М. Штонь, Ю.В. Коваль, О.М.Сніцерова, М.Ф. Гамалія

Більшість біологічних молекул не поглинає світла в видимій області, проте демонструє потужні смуги поглинання в ультрафіолетовій частині спектру. Біологи надають перевагу дослідженням УФ-поглинання для визначення ступені чистоти ДНК, РНК, протеїнів у зразку. Оцінюючи, наприклад, у спектрі поглинання ДНК інтенсивність максимуму при 260 нм, можна кількісно визначити її концентрацію. Цей метод не є, звичайно, абсолютно точним, проте він дуже широко застосовується завдяки своїй простоті, швидкості отримання результату, високій чутливості і невеликій кількості потрібного матеріалу.

Тому комплексні можливості спектроскопії, в тому числі аналіз УФ-спектрів поглинання біологічних тканин, є перспективними в застосуванні в області медичної діагностики, зокрема, онкозахворювань.

Можна стверджувати, що за 100 років, що пройшли від часів першої ідентифікації В-клітинного хронічного лімфолейкозу (В-ХЛЛ) як окремої хвороби, знань про фізіологію лейкозних клітин накопичилось дуже багато. Нажаль, ця хвороба займає чільне місце серед онкогематологічних захворювань і діагностується переважно у людей похилого віку (починаючи від 60 років), коли ефективність роботи імунної системи людини і без того суттєво знижується [2].

Проте, незважаючи на довгу історію вивчення, а також на доступність клітин лімфоцитів для проведення широкопланових експериментальних досліджень, природа виникнення цього захворювання досі не до кінця зрозуміла.

Схема гемопоезу, згідно якої зі стовбурових клітин кісткового мозку утворюються різні клітини крові, зокрема, і В-лімфоцити, є складним процесом, що включає в себе послідовне кількаступеневе перетворення клітини. Для нас в даному розгляді важливим є те, що початок цього ланцюгу перетворень знаходиться у кістковому мозку, а кінець - у крові, де лімфоцит в нормі живе протягом кількох діб і потім руйнується. В-лімфоцити у хворого на В-ХЛЛ відрізняються від цих клітин здорової людини тим, що на певному етапі свого розвитку вони нібито завмирають і перестають «старіти». В такому стані вони знаходяться дуже довго – до двох місяців, поки, нарешті, гинуть. Оскільки кістковий мозок продовжує продукувати нові злоякісні лімфоцити, їх загальна кількість в крові стає дуже великою ($>10^{10}$/л). Слід додати, що такі клітини не виконують свої нормальні імунозахисні функції.

Можливості спектроскопії є досить потужними як для деталізації структури біологічних речовин, так і з для отримання висновків щодо їх інтегральних властивостей. Спектри поглинання та свічення окремих складових біологічних клітин вивчені докладно див., наприклад, [3]. На сьогодні зроблені перші скромні спроби використати абсорбційну та аутофлуоресцентну спектроскопію для того, щоб проаналізувати патологічно змінені клітини як цілісний, живий об’єкт. Дана робота полягає саме в такому спектральному підході, спрямованому на вивчення значущої відмінності між патологічно зміненими та нормальними лейкоцитами і на ідентифікацію можливих біохімічних складових, що формують досліджувані спектри.

2. Матеріали та устаткування

Матеріал для аналізу (патологічно змінені і нормальні клітини) був одержаний за сприяння Інституту експериментальної патології, онкології та радіобіології ім. Р.Є. Кавецького НАНУ. Виділення лейкоцитів із цільної крові людини здійснювалось шляхом сепарування її на центрифузі у градієнті щільності фекол-урографіну з подальшим триразовим відмиванням клітин у фізіологічному розчині Хенкса. Концентрація лейкоцитів у досліджуваних розчинах NaCl (фізрозчин) складала 10^6 клітин/мл. Від моменту приготування зразка до отримання спектрів проходило від 15 до 30 хвилин. На момент запису спектрів ~90% клітин були живі. Розчини біохімічних сполук (ДНК, РНК, NAD, NAD-H, NADP, NADP-H) люб’язно надані Інститутом молекулярної біології та генетики (ІМБГ).

Спектри поглинання одержані на серійному двопроменевому спектрофотометрі Specord UV-VIS. Запис спектрів поглинання розчинів проводився в стандартних кварцевих кюветах товщиною 1 см (діапазон пропускання 170-1000 нм). Похибка запису хвильових чисел становила за паспортом 20 $см^{-1}$. Значення оптичної густини визначалось з точністю до 1% довжини оптичної шкали в режимі запису поглинання, тобто (від 0 до 1,4) – 0,02.

Всі отримані спектри поглинання розчинів біохімічних сполук ДНК, РНК, NAD, NAD-H,

NADP та NADP-H, наведені в даній статті, мають гарне співпадіння з відповідними спектрами, відомими з літератури, в області 220-400 нм. Однак, в літературі майже відсутні дані поглинання вказаних біохімічних сполук для діапазону 190-220 нм.

3. Порівняльний аналіз спектрів поглинання лейкоцитів з крові здорових донорів і лейкозних хворих

Слід зауважити, що під час досліджень спектрів лейкоцитарної маси хворих з підтвердженим діагнозом В-ХЛЛ було використано більше десяти різних зразків, взятих у хворих різної вікової категорії на різних стадіях захворювання. Спектри поглинання усіх зразків мали однакову характерну форму, що дає нам підстави для наступного аналізу. На рис. 1 наведено УФ спектр поглинання лейкоцитарної маси,

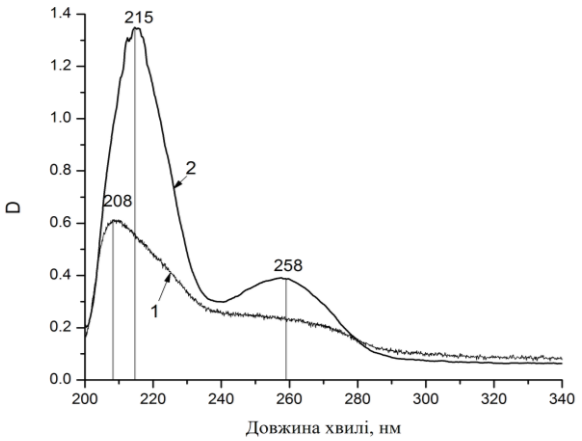


Рис. 1. Спектр поглинання лейкоцитарною масою здорової людини (кр. 1) та хворої на В-ХЛЛ (кр. 2).

отриманої від здорової людини (крива 1) та від хворої на В-ХЛЛ (крива 2). Спектр поглинання лейкоцитів в УФ-області має характерну «двогорбу» форму, з максимумами в області 215 нм та 260 нм. Проте, помітна суттєва відмінність у співвідношеннях інтенсивностей коротко- та довгохвильового максимумів на кривих 1 і 2: у лейкоцитарної маси від здорової людини воно складає 6:2,5, від хворої – 7:2.

Оскільки в крові у хворого на В-ХЛЛ накопичуються саме В-лімфоцити, а в крові здорової людини в нормі знаходяться в більшості Т-лімфоцити, для більш коректного порівняння спектрів поглинання лейкоцитарна маса здорової людини була розділена (методом розетко-утворення на еритроцитах барана) на

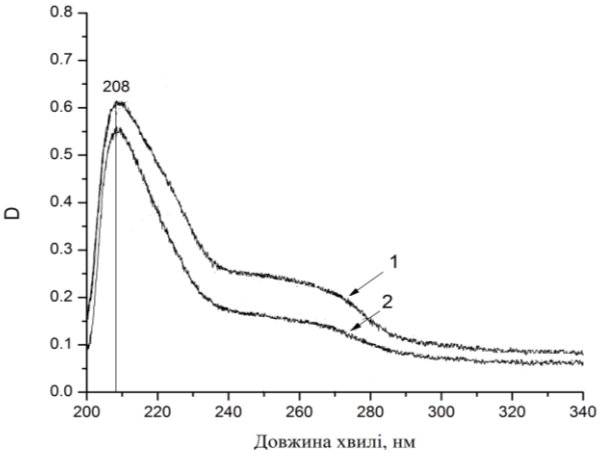


Рис. 2. Спектри поглинання лейкоцитарної маси (кр. 1) та В-лімфоцитів (кр. 2) здорової людини.

субпопуляції Т та В- лімфоцитів. На рис. 2 наведено спектри поглинання В-лімфоцитів та суцільної лейкоцитарної маси, одержаних з крові здорового донора. Аналіз цих спектрів дає можливістть зробити наступні, важливі для нашого дослідження висновки.

1. В обох спектрах короткохвильовий максимум (208 нм) співпадає;
2. Обидва спектри мають довгохвильову смугу в області 240-265 нм, без яскраво вираженого максимуму.
3. Отже, можна припустити, що головною складовою, що формує спектр лейкомаси, є В-лімфоцити, бо подібність кривих 1 та 2 на рис. 2 очевидна. Тому, враховуючи складність процесу розділення лейкоцитарної маси на Т та В компоненти для проведення первинного якісного порівняння спектрів поглинання В-клітин у зразках крові від хворих і здорових людей достатньо у першому наближенні використовувати спектри цільної лейкоцитарної маси.

4. Аналіз спектральних властивостей біохімічних складових, що формують спектри лейкоцитарної маси.

В ближній УФ області (190-360 нм) поглинають молекули, що мають ароматичні складові, в яких наявні делокалізовані π-електронні системи. Саме ці оптичні центри є визначальними для електронних спектрів, зокрема, поглинання біологічних об'єктів. π-електронвмісні системи локалізовані в окремих хромофорних групах. У протеїнах це – ароматичні амінокислоти (триптофан, фенілаланін, тирозин), У ДНК та РНК це –

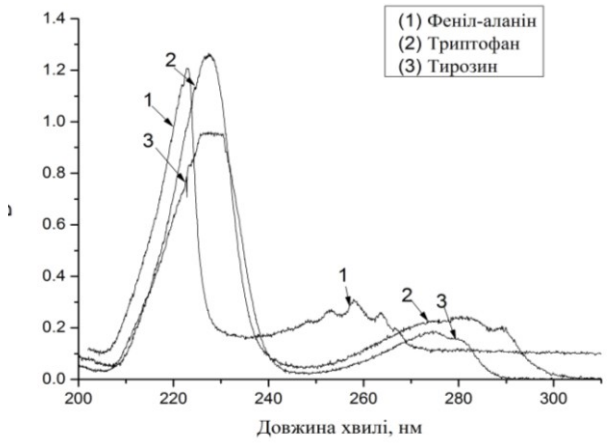


Рис. 3. Спектри поглинання ароматичних амінокислот.

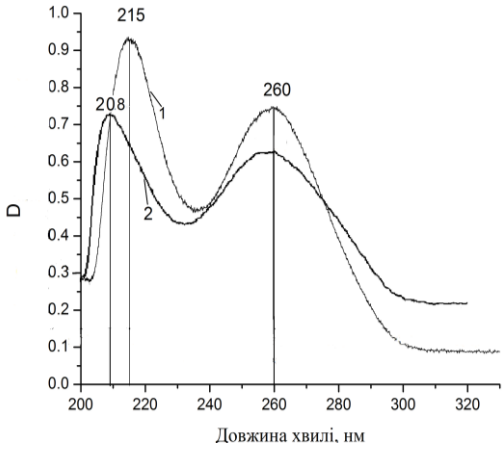


Рис. 5. Спектр поглинання РНК (кр. 1), ДНК (кр. 2).

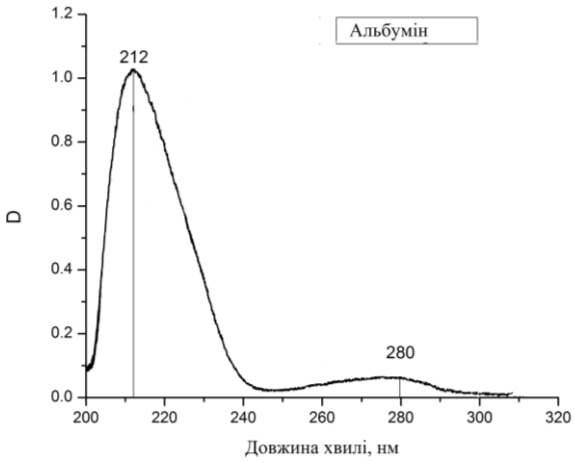


Рис. 4. Спектр поглинання людського альбуміну

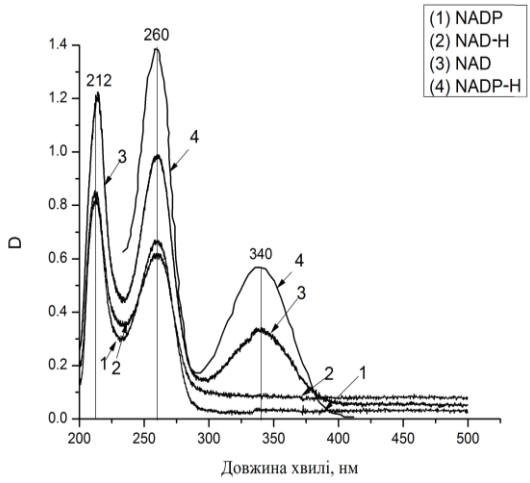


Рис. 6. Спектри поглинання коферментів.

нуклеотиди. Такі π-електронні системи наявні в структурі коферментів NAD, NADH, NADP та NADPH.

Джерелом смуги поглинання білків у довгохвильовій частині спектру з максимумом в області 230-290 нм є циклічні хромофори – ароматичні кільця амінокислот. Спектри мають чітко виражену коливальну структуру, характерну для бензолу, яка серед ароматичних амінокислот найбільш явно помітна у спектрі феніл-аланіна (рис. 3). В роботі [4] було показано, що домінуючий вклад в поглинання протеїнів в цій області дає триптофан. Тому в довгохвильовій частині УФ-спектру поглинання білків домінує смуга 280 нм (рис. 4).

Короткохвильовий максимум спектрів поглинання усіх ароматичних амінокислот забезпечується другим електронним переходом у відповідних ароматичних хромофорах та електронними переходами в лінійних хромофорах пептидних груп і лежить в межах 215-230 нм. Проте, оскільки в молекулі білка хромофорні групи залишків амінокислот з'єднані між собою безпосередньо, це призводить до гіпсохромного зсуву короткохвильового максимуму в спектрі білка порівняно з відповідними максимумами спектрів окремих амінокислот, залишки яких входять до складу білка. В результаті, білки мають потужну смугу поглинання з максимумом при 212 нм (рис. 4).

В спектрі зразка лімфоцитів від хворого на В-ХЛЛ (рис. 1) білкових смуг в явному вигляді немає (хоча, при невеликій інтенсивності вони швидше за все представлені у вигляді мінорної компоненти).

Максимум поглинання в області 260 нм, що стійко спостерігається в усіх пробах лімфоцитів від хворих на В-ХЛЛ, є характерними для РНК і

ДНК (рис. 5), а також коензимів NAD, NAD-H, NADP та NADP-H, які присутні в живій клітині (рис. 6). Смуга поглинання в області 260 нм у досліджених патологічно змінених клітин є чіткою, хоча і доволі широкою, її максимум має тенденцію до стійкого зміщення (до 5 нм) в бік коротких довжин хвиль.

Щодо NAD та NADP-H, то вказані речовини є активними учасниками внутрішньоклітинного окисно-відновного обміну, і для цих речовин є характерними максимуми поглинання ще і в довгохвильовій області УФ-діапазона (близько 340 нм), які на спектрах поглинання живих клітин (рис. 1) не проявляються зовсім. Отже, їх спектральний прояв у спектрах поглинання лімфоцитів можна вважати нехтовним.

Серед проаналізованих вище біохімічних речовин короткохвильовий максимум при 215 нм має тільки РНК. Близьке до нього значення короткохвильового максимуму спектру поглинання мають білок і коензими – 212 нм та ДНК – 208 нм.

Таким чином, проаналізувавши можливі складові спектру поглинання лімфоцитів у хворої на В-ХЛЛ людини, можна зробити припущення, що злоякісні клітини демонструють присутність відносно більшої кількості молекул РНК.

Існують дані див., наприклад, [4], згідно яких інтенсивність спектрального максимуму ДНК при 260 нм (рис. 6) залежить від наявності і кількості кисню в клітині: чим бідніша клітина на кисень, тим максимум вищий. В світлі цих даних отримана нами різниця в інтенсивності максимуму при 260 нм між нормальними і злоякісними лейкоцитами (рис. 1) може бути пов'язана з відомим відмінним характером окисно-відновного обміну пухлинних клітин.

Слід зазначити, що спектри поглинання нормальних та злоякісних лейкоцитів мають суттєві відмінності. Короткохвильовий максимум спектру нормальних клітин (рис. 1) гіпсохромно зміщений на 7-10 нм по відношенню до відповідного максимуму клітин від лейкозного хворого. Разом з тим в порівнянні з відповідною смугою лейкоцитів хворого, довгохвильове плече смуги поглинання лейкоцитів здорової людини є значно слабшим за інтенсивністю, смуга є доволі широкою, займаючи діапазон 240-280 нм, а максимум практично невиражений. Це може свідчити про радикальне зменшення вкладу РНК, натомість, збільшення впливу ДНК на загальний спектр на фоні загального збагачення клітин киснем.

5. Порівняльний аналіз поглинання лейкоцитів здорового донора, лейкоцитів від хворого на В-ХЛЛ та клітин культури Namalwa

Namalwa є модельною клітинною культурою, що отримана шляхом злоякісної трансформації людських В-лімфоцитів в результаті приєднання до їх ДНК частини ДНК віруса Епштейна-Барра. Таким чином, В-клітини отримали невластиву їм здатність активно ділитися. На рис. 7 наведено спектри поглиннння лейкоцитів від здорової людини, від хворої на В-ХЛЛ та клітин культури Namalwa. Особливістю спектру поглинання

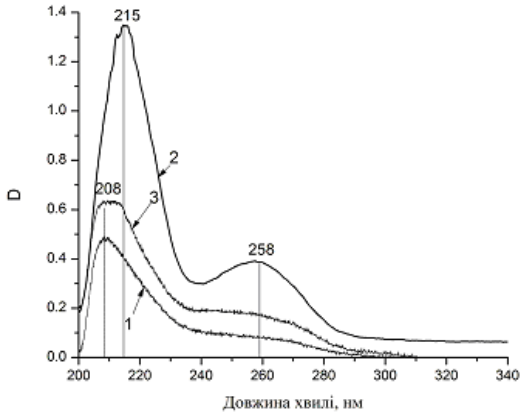


Рис. 7. Спектр поглинання лейкомаси здорової людини (кр. 1), хворої на В-ХЛЛ (кр. 2), клітинної культури Namalwa (кр. 3).

клітин Namalwa є більш широка короткохвильова смуга, яка, очевидно, демонструє наявність двох центрів поглинаня, яким відповідають дві близько розташовані смуги з максимумами при 208 нм та 215 нм, перший з яких співпадає з максимумом спектру поглинання клітин здорової людини, а другий – хворої. Довгохвильове плече спектру Namalwa схоже за формою на таке у спектрі поглинання клітин від здорової людини. На нашу думку, спектр Namalwa відображає наявність і ДНК і РНК, яка утворюється в клітинах внаслідок їх активного поділу. В той же час, присутність великої кількості РНК (значно більшої, ніж в клітинах Namalwa) в клітинах від хворих на В-ХЛЛ поки не має переконливого пояснення, оскільки ці клітини зовсім не діляться.

Висновки

За результатами проведених досліджень можна зробити припущення, що причиною встановленої відмінності УФ-спектрів

поглинання лейкоцитарної маси здорових людей та хворих на В-ХЛЛ, є наявність в лімфоцитах хворих великої (значно більшої, ніж в клітинах від здорової людини) кількості РНК. Факт наявності вказаної відмінності може в перспективі виявитись корисним в якості додаткового показника для встановлення діагнозу В-ХЛЛ.

Список використаних джерел

1. *Ящук В.М*., Ткачук З.Ю., Левченко С.М. та ін.. Люмінесценція протеїнів і полірибонуклеотидів. Можливість спектрального тестування їх взаємодії./ В.М.Ящук, З.Ю. Ткачук, С.М. Левченко та ін.. //Біотехнологія -2012. –т. 5, N 4, С. 104-111.

2. *Глузман Д.Ф* Диагностическая онкогематология / Д.Ф.Глузман, Л.М. Скляренко, В.А Надгорная– Киев: ДИА, 2011.-253с.

3. *Тюкавкина Н.А* Биоорганическая химия / Н.А. Тюкавкина, Ю.И. Бауков - Москва: «Медицина», 1991.- с. 274

4. *Rupak* D. Spectrophotometric analysis of nucleic acids: oxygenation-dependant hyperchromism of DNA / Rupak Doshi, Philip J. R. Day, Paolo Carampin, Ewan Blanch, Ian J. Stratford, Nicola Tirelli // Anal Bioanal Chem.- 2010.- Vol. 396. - pp.2331–2339

5. *Yashchuk V*. Optical Response of the Polynucleotides-Proteins Interaction /Yashchuk V., Kudrya V., S. Levchenko, Z. Tkachuk, D.Hovorun, V.Melnyk, V.Vorob'yov, G.Klishevich// Mol. Cryst. Liq. Cryst.- Vol. 535.- pp. 93–110, 2011

6. *Lacowicz R.* Principles of Fluorescence Spectroscopy. / R.Lacowicz//NY: Sprin. ger Science, 2006.

7. *Yashchuk V.*The nature of the electronic excitation capturing centers in the DNA / *V.Yashchuk,V.Kudrya, M.Losytskyy et all* // J. Mol. Liq. – 2006. – V. 127, Iss. 1–3. – P. 79– 83.

8. *Parsas N. Prasad* IIntroduction to Biophtonics,/ N. Prasad. - N.Y.John Wiley @ Sons, 2008, P.77.

9. *Ящук В.М.* Фотоніка полімерв / В.М.Ящук// - К., ВПЦ "Київський університет", 2004, 112 с.

References

1. YASHCHUK, V. TKACHUK, Z. LEVCHENKO, S. et all. (2012). Luminescenciya proteiniv i polyrybonukleitydiv. Mozhlyvist sprktralnogo testuvannya ih vzayemodii. *Biotehnologija* -.V. 5: Iss 4. pp. 104-111.

2. GLUZMAN, D. (2011) *Diagnosticheskaya onkogematologiya.*Kiev: DIA.

3. TUKAVKINA, N., BAUKOV, Yu. (1991) *Bioorganicheskaja himiya.* Moskva: Meditsina.

4. DOSHI, R. DAY, P. CARAMPIN, P. BLANCH, E. STRATFORD, I. TIRELLI, N. Spectrophotometric analysis of nucleic acids: oxygenation-dependant hyperchromism of DNA. *Anal Bioanal Chem.(*2010).Vol. 396: p.2331–2339.

5. YASHCHUK, V. KUDRYA, V., LEVCHENKO, S. TKACHUK, Z. HOVORUN, D. MEL'NIK, V., VOROB'YOV, V., KLISHEVICH, G. (2011) Optical Response of the Polynucleotides-Proteins Interaction. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* V. 535: p. 93–110.

6. LACOWICZ, R. (2006) *Principles of Fluorescence Spectroscopy*. NY: Springer Science.

7. YASHCHUK, V. KUDRYA, V. LOSYTSKYY, M. et al. (2006) The nature of the electronic excitation capturing centers in the DNA. *J. Mol. Liq.* V. 127: Iss. 1–3. p. 79– 83.

8. PRASAD, N. (2008) *IIntroduction to Biophtonics*. N.Y.John Wiley @ Sons, , P.77.

9. YASHCHUK, V. Fotonika polimeriv (2004) K. "Kyivskij Universytet". P. 112.

Надійшла до редколегії 15.05.2014

Підписано до друку . Формат _____. Друк. офс.
Папір офс. №__. Друк. арк. ____. Тираж _____. Зам. ____.
Друкарня _____.