

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО
УНІВЕРСИТЕТУ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

СЕРІЯ ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК №3 2015

**Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка,
выпуск №3, 2015,
Серія фізико-математичні науки**

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

Журнал “Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки” включено до переліку фахових видань ВАК України та реферується в Реферативному журналі та базах даних ВИНІТИ, Росія, Москва.

Редакційна колегія:

Анісімов Анатолій Васильович, чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф., **головний редактор**;
Хусаїнов Денис Яхєвич, д.ф.-м.н., проф., **заступник головного редактора, відповідальний за видання**;
Arturs Medvids, Dr. Phys. (habil.), Prof., Riga Technical University, Riga, Latvia;
Miklós Rontó, Dr. Sci., Prof., University of Miskolc, Miskolc, Hungary;
Milada Bartlova, Ph. D., Brno University of Technology, Brno, Czech Republic;
Nickolai Kukhtarev, Prof., Alabama A&M University, Alabama, USA;
Sergei Gorlatch, Dr. Sci. (habil.), Prof., University of Muenster, Muenster, Germany;
Sergey Trofimchuk, Prof., Universidad de Talca, Instituto de Matematica y Fisica, Talca, Chile;
Stefan Hudak, Dr. Sci., Prof., Technical University of Kosice, Kosice, Slovak Republic;
Toru Aoki, Ph. D., Prof., Research Institute of Electronics, Shizuoka University, Shizuoka, 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.;
Гарашенко 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

Самойлович І.О. Скінченна породженість вінцевих добутоків груп за деревовидно впорядкованими множинами	9
--	---

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Михайленко С.В. Стаціонарні розв'язки рівняння нелінійного осцилятора з моногармонічним збудженням	17
Опанасович В.К., Слободян М.С., Бедрій В.Я. Двовісний згин ізотропної пластини з прямокутною жорсткою шайбою та прямолінійною наскрізною тріщиною з урахуванням ширини області контакту її берегів	21
Паткін Є.Д. Опис мартингальних мір для однієї еволюції ризикових активів	25
Репета Б.В. Аналог біфуркації Андронова-Гопфа у системі з кривою положень рівноваги	29
Семенова І.Ю. Нелінійні коливання рідини в параболічному резервуарі при наявності пружного закріплення	35
Шалденко О.В., Гуржій О.А. Аналіз процесів теплопередачі в криволінійному каналі при малих числах Рейнольдса	39

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Бармак О.В., Крак Ю.В. Інформаційна технологія для класифікації слабо роздільних елементів дактильної абетки жестової мови	45
Бейко І.В., Зінько П.М. Алгоритми розв'язуючих операторів у чисельному моделюванні складних систем з підвищеною точністю	49
Власюк А.П., Цветкова Т.П. Математичне моделювання масоперенесення солей при нестационарній фільтрації і вологоперенесенні в насичено-ненасиченому ґрунтовому масиві	55
Галкін О. А. Непараметричний метод класифікації для задач з нееліптичним розподілом даних на основі глибиннозалежної Σ -схеми	60
Галкін О.В., Верес М.М., Поляченко А.І. Застосування кусково-лінійних моделей в задачах прогнозування	66
Гаркуша Н.І. Дослідження динаміки однієї математичної моделі популяції при малих щільностях популяції жертви	72
Івохін Є.В., Вадньов Д.О. Про реалізацію кількісних запитів в нечітких базах даних	76
Картавов М.О., Панченко Т.В., Поліщук Н.В. Доведення тотальної коректності системи Infosoft e-Detaling у IPL	80
Коваль Ю.В. Протокол багатоточкового потоку: доведення коректності методом інерційного моделювання	84
Колянова Т.В. Модифікована математична модель, що описує взаємодію антигенів та антитіл в організмі людини	90
Лавер В.О. Нечіткі узагальнення класичних методів розподілу	94
Марченко О.О. Метод формального концептуального аналізу на основі векторів семантико-синтаксичної валентності слів	100
Пискунов А.Г. Об отличиях между понятиями типа и класса	106
Савкіна М.Ю. Алгоритм перевірки на коректність моделі двофазної нелінійної регресії	115
Страхов Є.М., Яровий А.Т. Трикроковий метод для задачі багатовимірної оптимізації	121
Тарануха В.Ю. Властивості згладженої n-грамної моделі для слов'янських мов, заснованої на класах	127
Терещенко В.М., Корюкалов О.В. Пошук найкоротшого шляху на множині геометричних об'єктів	131
Шкільняк О.С. Модальні логіки немонотонних часткових предикатів	141

Шкільняк С. С., Волковицький Д. Б. Безкванторно-функціональні логіки часткових квазіарних предикатів	148
--	-----

РАДІОФІЗИКА

Обуховський В.В., Шилін А.В. Порівняння моделей опису в'язкості бінарних молекулярних сумішей	157
Первак Ю.О. Вплив поглинання на спектральні характеристики дисперсійних дзеркал	165

СУЧАСНА ФІЗИКА

Весна Г.В., Гуменюк А.Ф., Дегода В.Я., Маразуєв Ю.А. Кінетика рекомбінаційної люмінесценції і провідності кристалофосфорів. 1. Накопичення носіїв заряду на мілких пастках	171
Закіров М. І., Свеженцова К. В., Коротченков О. О. Люмінесценція порошків ZnO отриманих під дією ультразвуку	183
Лопатинська О. Г., Лопатинський А. М., Чегель В. І., Поперенко Л. В. Локалізований поверхневий плазмонний резонанс в наночастинках срібла в полімерній матриці	189
Мельник Д.Б., Науменко А.П., Ящук В.М., Герасьов А.О., Качковський О.Д. Спектри поглинання та анізотропії збудження флюоресценції мероціанінів, похідних амінокумарину	195
Петренко В.І., Іваньков О.І., Авдєєв М.В., Ніколаєнко Т. Ю. Просторова структура рідинних систем на основі наночастинок магнетиту з органічним покриттям	203
Рапопорт Ю. Г., Бордман А. Д. Моделювання «від характеристик метачастинки до характеристик нелінійних хвиль в шаруватих активних бі-анізотропних метаматеріалах з об'ємними та поверхневими нелінійностями»	207
Стебленко Л. П., Ященко Л. М., Воронцова Л. О., Курилюк А. М., Кобзар Ю. Л., Науменко С. М., Кріт О. М., Калініченко Д. В. Зміна структури та мікромеханічних характеристик епоксиретанових композитів, обумовлена способом введення наповнювача та його концентрацією в полімерній матриці	213
Теселько П.О. Рентгенодифракційні дослідження кінетики дефектоутворення в опромінених нейтронами кристалах Cz-Si	217

CONTENTS

ALGEBRA, GEOMETRY AND PROBABILITY THEORY

Samoilovych I.O. On finite generation of wreath products of groups indexed by tree ordered sets	9
---	---

DIFFERENTIAL EQUATIONS, MATHEMATICAL PHYSICS AND MECHANICS

Mikhaylenko S.V. Stationary solutions of equations for nonlinear oscillator with anharmonic perturbation	17
Opanasovich V.K., Slobodyan M.S., Bedriy V.Y. Biaxial bending of an isotropic plate with rectangular rigid washer and rectilinear crosscutting crack with account of width of contact area between it's edges	21
Patkin I.D. Description martingale measures for a single evolution of risky assets	25
Repeta B.V. A counterpart of the Andronov-Hopf bifurcation in a system with a curve of equilibria	29
Semenova I.Yu. Nonlinear liquid sloshing in a parabolic tank with elastic fixation	35
Shaldenko O.V., Gourjii A.A. Analysis of heat transfer processes in the curvilinear channel at low Reynolds numbers	39

COMPUTER SCIENCES AND INFORMATICS

Barmak O. V., Krak Iu. V. Information technology for classifying slightly separate elements sign language alphabet	45
Beyko I.V., Zinko P.M. Solve-operator algorithms in high-precision simulators of complex systems	49
Vlasyuk A.P., Tsvetkova T.P. Mathematical modelling of salts mass transfer under non-stationary filtration and moisture transfer in saturated nonsaturated soil mass	55
Galkin O. A. Nonparametric classification method for problems with non-elliptical distribution of data based on depth dependent Σ -diagram	60
Galkin O. V., Veres M.M., Polyachenko A. I. The use of piecewise linear regression in forecasting problems	66
Garkusha N. I. Investigation dynamics of mathematical model of the of population with low densities of prey	72
Ivohin E.V., Vadnyev D.O. About realization quantitative requests in fuzzy databases	76
Kartavov M.O., Panchenko T.V., Polishchuk N.V. Infosoftware e-Detailing System Total Correctness Proof in IPCL	80
Koval Iu. V. Multipoint stream protocol: proof of correctness by the insertion programming method	84
Kolianova T.V. Modified mathematical model that describes the interaction antigens and antibodies in the human body	90
Laver V.O. Fuzzy generalization of classical rationing methods	94
Marchenko O.O. A method of formal concept analysis based on semantic-syntactic valence vectors of words	100
Piskunov A.G. About the differences between the notions of type and class	106
Savkina M.Yu. The algorithm of checking for correctness of two-phase nonlinear regression model	115
Strakhov E. M., Yarovsky A. T. A Three-Term Method for Unconstrained Optimization	121
Taranukha V. Y. Properties of smoothed class-based n-gram model for Slavic languages	127
Tereshchenko V.M., Koriukalov O.V. Searching shortest paths on a set of geometric objects	131
Shkilniak O.S. Modal logics of non-monotone partial predicates	141
Shkilniak S.S., Volkovitskyi D.B. Free-quantifier functional logics of partial quasi-ary predicates	148

RADIOPHYSICS

Obukhovskiy V.V., Shylin A.V. The comparison of viscosity description for molecular binary mixtures	157
Pervak Yu.O. Impact of absorption on the spectral characteristics of dispersive mirrors	165

MODERN PHYSICS

Vesna G.V., Gumenuk A.F., Degoda V.Y., Marazuev U.A. The kinetic of the recombination luminescence and conductivity of crystallophosphorus. 1. The accumulation charge carrier on shallow traps	171
Zakirov M., Svezhentsova K., Korotchenkov O. Luminescence of ZnO powders grown in ultrasonic fields	183
Lopatynska O. G., Lopatynskiy A. M., Chegel V. I., Poperenko L. V. Localized surface plasmon resonance in the silver nanoparticles embedded in the polymer matrix	189
Melnik D.B., Naumenko A.P., Yashchuk V.M., Gerasov A.O., Kachkovsky O.D. The absorption and fluorescence anisotropy spectra of merocyanins, aminocoumarine derivatives	195
Petrenko V.I., Ivankov O.I., Avdeev M.V., Nikolaienko T. Yu. Spatial structure of liquid systems with organic-coated magnetite nanoparticles	203
Rapoport Yu. G., Boardman A. D. Modeling “from the characteristics of a metaparticle to the characteristics of nonlinear waves in layered active bi-anisotropic metamaterials with the volume and surface nonlinearities”	207
Stebenko L. P., Yashchenko L. M., Voronzova L. O., Kuryliuk A. M., Kobzar Yu. L., Naumenko S. M., Kryt A. M., Kalinichenko D. V. The changes in the structure and micromechanical characteristics of epoxyurethane composites caused by the method of adding of filler and its concentration in the polymer matrix	213
Teselko P. O. X-ray diffraction investigation of defects formation kinetics in the neutron-irradiated Cz-Si crystals	217

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРИЯ ТА ТЕОРИЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

УДК 512.54

I.O. Самойлович

**Скінченна породженість вінце-
вих добутків груп за деревовидно
впорядкованими множинами**

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Володи-
мирська, 64.
e-mail: samoil449@gmail.com

I.O. Samoilovych

**On finite generation of wreath products
of groups indexed by tree ordered sets**

Taras Shevchenko National University of
Kyiv, 01033, Kyiv, 64 Volodymyrska st.
e-mail: samoil449@gmail.com

*Встановлено достатні умови скінченно породженості у топологічному сенсі вінцевого до-
бутку транзитивних, скінченних, нетривіальних груп підстановок за деревовидно впорядкова-
ними множинами.*

Ключові слова: вінцевий добуток, проскінченна група, скінченна породженість.

Let Λ to be a partially ordered set without infinitely increasing chains and let (G_λ, X_λ) be a collection of finite nontrivial permutation groups for $\lambda \in \Lambda$. If wreath product of G_λ by Λ is topologically finitely generated then direct product of abelianizations of G_λ indexed by the set Λ and direct product of groups G_λ indexed by the set of maximal elements of Λ are topologically finitely generated and there exists such constant d that number of generators of G_λ is not greater then a product of d and all $|X_\mu|$ for $\mu > \lambda$ for all $\lambda \in \Lambda$. If all groups G_λ are transitive and direct product of G_λ by the set Λ is topologically finitely generated then wreath product of groups G_λ by Λ is also topologically finitely generated. In this article we provide sufficient condition when the wreath product of transitive, finite, nontrivial groups indexed by tree ordered set is topologically finitely generated.

Key Words: wreath product, profinite group, finite generation.

Communicated by Prof. Kozachenko Yu.V.

1 Introduction

Wreath product is one the standard operations on groups, which plays a fundamental role in many algebraic constructions. There are several ways to generalize wreath product. Hall [6], Silcock [10], Dixon and Fournelle [4] studied restricted generalized wreath products. Different approaches to unrestricted wreath product indexed by poset were proposed by Holland [7], Wells [11] and Feinberg [5]. Later, these definitions were summarized by Behrendt [1].

Lavrenyuk and Oliynyk [8] studied generalized wreath products of groups indexed by tree ordered sets. They obtained an isomorphism criterion for such wreath products for certain ordered sets and permutation groups. In this paper, based on some preliminary results from [9], we provide certain sufficient conditions for finite generation of wreath products indexed by tree ordered sets. These conditions are similar to the conditions given by Bondarenko [2] for infinitely iterated wreath products (Bondarenko's result was further generalized by Detomi and Luchchini [3]).

2 Basic definitions

Let us fix a partially ordered set $(\Lambda, \leq)$ and a permutation group (G_λ, X_λ) for each $\lambda \in \Lambda$. Put

$$X = \prod_{\lambda \in \Lambda} X_\lambda = \{(x_\lambda)_{\lambda \in \Lambda} \mid x_\lambda \in X_\lambda\}.$$

By symbol $\emptyset$ we denote the empty set. Then

$$\overline{X}_\lambda = \begin{cases} \{\emptyset\}, & \text{if } \lambda \text{ is maximal element;} \\ \prod_{\mu > \lambda} X_\mu, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

The wreath product $W = wr_{\lambda \in \Lambda} G_\lambda$ of groups $(G_\lambda, X_\lambda)_{\lambda \in \Lambda}$ indexed by partially ordered set Λ is the permutation group on the set X that consists of elements

$$g = (g_{(y, \lambda)})_{\lambda \in \Lambda, y \in \overline{X}_\lambda}, \text{ where } g_{(y, \lambda)} \in G_\lambda.$$

The action of an element g on a point $x = (x_\mu)_{\mu \in \Lambda} \in X$ is given by the following rule:

$$g(x) = (g_{(y_\lambda, \lambda)}(x_\lambda))_{\lambda \in \Lambda} \in X, \text{ where } y_\lambda = (x_\mu)_{\mu > \lambda}.$$

The product of two elements $g = (g_{(y,\lambda)} \in G_\lambda)_{\lambda \in \Lambda, y \in \overline{X_\lambda}} \in W$ and $h = (h_{(y,\lambda)} \in G_\lambda)_{\lambda \in \Lambda, y \in \overline{X_\lambda}} \in W$ is defined by the following rule:

$$g \cdot h = (g_{(y,\lambda)} h_{(g(y),\lambda)})_{\lambda \in \Lambda, y \in \overline{X_\lambda}}.$$

The set of all elements of Λ that larger or equal to λ we denote by λ^∇ . The symbol $\mathfrak{B}$ stands for the collection of all sets of the form $\cup_{\lambda \in I} \lambda^\nabla$, where I is a finite subset in Λ . The set $\mathfrak{B}$ is a directed set ordered by inclusion, i.e., the set $\Lambda_1 \in \mathfrak{B}$ is less than the set $\Lambda_2 \in \mathfrak{B}$ if and only if $\Lambda_1 \subseteq \Lambda_2$.

Let $\Lambda_1, \Lambda_2 \in \mathfrak{B}$ and $\Lambda_1 \subseteq \Lambda_2$. We consider the restriction map $\varphi_{\Lambda_1, \Lambda_2} : W_2 = wr_{\lambda \in \Lambda_2} G_\lambda \rightarrow W_1 = wr_{\lambda \in \Lambda_1} G_\lambda$, i.e., for all $g \in W_2$ the element $\varphi_{\Lambda_1, \Lambda_2}(g) \in W_1$ acts as g on the set Λ_1 . The map $\varphi_{\Lambda_1, \Lambda_2}$ is well-defined and it is a homomorphism, because for every $\lambda \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1$ and $\mu \in \Lambda_1$ either $\lambda \leq \mu$ or elements λ and μ are incomparable. Then the collection of groups $(wr_{\lambda \in \Delta} G_\lambda)_{\Delta \in \mathfrak{B}}$ and homomorphisms $\varphi_{\Lambda_1, \Lambda_2}$ form an inverse system, and we can consider its inverse limit.

Proposition 1. [9] *The wreath product of groups (G_λ, X_λ) indexed by the poset Λ coincides with the inverse limit of groups $(wr_{\lambda \in \Delta} G_\lambda)_{\Delta \in \mathfrak{B}}$.*

We say that a topological group W is *topologically generated by its subset S* if the subgroup generated by S is dense in W . If S is finite, then we say that W is *topologically finitely generated*. By $d(W)$ we denote the minimal number of generators in topological sense.

3 Main theorem

In this section we consider a poset $(\Lambda, \leq)$ and a collection of permutation groups $(G_\lambda, X_\lambda)_{\lambda \in \Lambda}$ which satisfy the following restrictions

- 1) every group G_λ is finite and nontrivial;
- 2) for every $\lambda \in \Lambda$ the set λ^∇ is finite, i.e., Λ does not contain infinitely increasing chains.

Then the wreath product $W = wr_{\lambda \in \Lambda} G_\lambda$ is a profinite group. This allows us to consider the group W as a topological group.

We introduce some notations that we will use in the article. Let $W = wr_{\lambda \in \Lambda} G_\lambda$. If A is a subset of W then for $\lambda \in \Lambda$ and $x \in \overline{X_\lambda}$ we use notation $A_{(x,\lambda)} = \{g_{(x,\lambda)} \mid g \in A\} \subset G_\lambda$. By $\max \Lambda$ we denote the set of all maximal elements of the poset Λ . Also for $\lambda \in \Lambda$ we define the set $LN(\lambda) = \{\mu \in$

$\Lambda \mid \mu < \lambda \text{ and there is no } \nu \in \Lambda \text{ such that } \mu < \nu < \lambda\}$. The commutator subgroup of a group G we denote by G' .

Theorem 3.1. *Let a poset Λ and a collection of transitive permutation groups $(G_\lambda)_{\lambda \in \Lambda}$ satisfy the conditions 1) and 2). Additionally, we suppose that the following conditions hold:*

- (i) $LN(\lambda) \cap LN(\mu) = \emptyset$ for any different $\mu, \lambda \in \Lambda$;
- (ii) there exists a constant C such that $d\left(\prod_{\mu \in LN(\lambda)} G_\mu\right) \leq C$ for all $\lambda \in \Lambda$;
- (iii) $d\left(\prod_{\mu \in \max \Lambda} G_\mu\right) < \infty$;
- (iv) $d\left(\prod_{\lambda \in \Lambda} G_\lambda / G_\lambda'\right) < \infty$.

Then the group $W = wr_{\lambda \in \Lambda} G_\lambda$ is topologically finitely generated.

Let $\Lambda_1 = \{\lambda \in \Lambda \setminus \max \Lambda \mid G_\lambda \text{ is abelian}\}$. The conditions of the theorem imply that we can choose a finite system of generators for the following groups:

$$\prod_{\mu \in \max \Lambda} G_\mu = \langle p_1, p_2, \dots, p_\alpha \rangle;$$

$$\prod_{\mu \in LN(\lambda)} G_\mu = \langle c_i^\lambda \mid 1 \leq i \leq C \rangle,$$

$$\text{where } c_i^\lambda = (c_{i,\mu}^\lambda)_{\mu \in LN(\lambda)};$$

$$\prod_{\lambda \in \Lambda} (G_\lambda / G_\lambda') = \langle s'_1, s'_2, \dots, s'_\beta \rangle, \quad s'_i = (s'_{i,\lambda})_{\lambda \in \Lambda},$$

$$\text{where } s'_{i,\lambda} \in G_\lambda / G_\lambda';$$

$$\prod_{\lambda \in \Lambda_1} G_\lambda = \langle a_1, a_2, \dots, a_\gamma \rangle, \quad a_i = (a_{i,\lambda})_{\lambda \in \Lambda_1}.$$

For $\lambda \in \Lambda$ we denote by $|\lambda|$ the distance from λ to the maximal element of Λ . Also we denote by $\lambda - i$ an element of Λ at distance i from λ towards the maximal element of Λ . The set λ^∇ is a finite chain for every $\lambda \in \Lambda$. If $\lambda^\nabla = \{\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n\}$ then we will denote each element x in $\overline{X_\lambda}$ by the word $x_{\lambda_1} x_{\lambda_2} \dots x_{\lambda_n}$.

For each λ we define the following group

$$H_\lambda = \begin{cases} G_\lambda, & \text{if } \lambda \in \Lambda_1 \cup \max \Lambda; \\ G_\lambda', & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Since the group H_λ is non-trivial, there exists a permutation $\pi_\lambda \in H_\lambda$ such that $\pi_\lambda(1_\lambda) = 2_\lambda$ for

two points $1_\lambda \neq 2_\lambda$. Let $\overline{1}_\lambda = 1_{\lambda-|\lambda|} \dots 1_{\lambda-1} 1_\lambda$. Note that $\overline{1}_{\lambda-(n)}$ is the empty word for $n > |\lambda|$.

In order to prove Theorem 3.1 we will use a sufficient condition for finite generation of wreath products established in [9, Lemma 4]. For this it is sufficient to show that for any finite set $\Delta \in \mathfrak{B}$ the following upper bound holds:

$$d(wr_{\lambda \in \Delta} G_\lambda) \leq d\left(\prod_{\mu \in \max \Lambda} G_\mu\right) + 3C + 2d\left(\prod_{\lambda \in \Lambda} (G_\lambda / G_{\lambda'})\right).$$

We choose the system of generators for $wr_{\lambda \in \Delta} G_\lambda$ as follows:

- (a) We chose elements $\overline{p}_i$ such that $(\overline{p}_i)_{(\emptyset, \lambda)} = (p_i)_\lambda$, and $(\overline{p}_i)_{(x, \lambda)}$ is trivial for $x \neq \emptyset$.
- (b) For all $1 \leq i \leq C$ we set:

$$(\overline{q}_i)_{(x, \lambda)} = \begin{cases} c_{i, \lambda}^{\lambda-1}, & \text{if } |\lambda| = 1 \text{ and } x = 2_{\lambda-1}, \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

- (c) We fix a finite collection $\overline{a}_1, \overline{a}_2, \dots, \overline{a}_\gamma \in W$:

$$(\overline{a}_i)_{(x, \lambda)} = \begin{cases} a_{i, \lambda}, & \text{if } \lambda \in \Lambda_1 \cap \Delta \\ & \text{and } x = \overline{1}_{\lambda-2} 2_{\lambda-1}, \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

- (d) We define two similar collections. Let us define $\overline{b}_i, 1 \leq i \leq C$ as follows:

$$(\overline{b}_i)_{(x, \lambda)} = \begin{cases} c_{i, \lambda}^{\lambda-1}, & \text{if } |\lambda| \geq 2, |\lambda| \text{ is even} \\ & \text{and } x = \overline{1}_{\lambda-3} 2_{\lambda-2} 2_{\lambda-1}, \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Also we choose a similar collection of $\overline{h}_i, 1 \leq i \leq C$ for the case when $|\lambda|$ is odd:

$$(\overline{h}_i)_{(x, \lambda)} = \begin{cases} c_{i, \lambda}^{\lambda-1}, & \text{if } |\lambda| \geq 2, |\lambda| \text{ is odd} \\ & \text{and } x = \overline{1}_{\lambda-3} 2_{\lambda-2} 2_{\lambda-1}, \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

- (e) For each i we choose $s_i = (s_{i, \lambda})_{\lambda \in \Lambda} \in \prod_{\lambda \in \Lambda} G_\lambda$ such that for every $\lambda \in \Delta$ it holds: $s_{i, \lambda} \in s'_{i, \lambda} G_{\lambda'}$ where $s'_{i, \lambda} G_{\lambda'}$ is coset of the group $G_{\lambda'}$. Let us fix $\overline{s}_i \in wr_{\lambda \in \Delta} G_\lambda$ as follows

$$(\overline{s}_i)_{(x, \lambda)} = \begin{cases} s_{i, \lambda}, & \text{if } |\lambda| > 0 \\ & \text{and } x = \overline{1}_{\lambda-2} 2_{\lambda-1}, \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Let A be the group generated by all elements from items (a)–(e). Before we prove Theorem 3.1 we need the following auxiliary statement.

Lemma 1. For any $\lambda \in \Delta$ there are subgroups $F_\lambda, S_\lambda < A$ such that

$$(F_\lambda)_{(x, \mu)} = \begin{cases} H_\lambda, & \text{if } \mu = \lambda \text{ and } x = \overline{1}_{\lambda-1}; \\ \{e\}, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

$$(S_\lambda)_{(x, \mu)} = \begin{cases} H_\lambda, & \text{if } \mu = \lambda \text{ and } x = \overline{1}_{\lambda-2} 2_{\lambda-1}, \\ \{e\}, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Proof. We prove this lemma by induction on $|\nu|$. If $|\nu| = 0$ then ν is a maximal element and elements $\{\overline{p}_1, \overline{p}_2, \dots\}$ from item (a) can generate the required groups. For induction step we assume that for all $|\lambda| < |\nu|$ the induction assumption holds. We suppose that we are able to generate S_ν . Then we can get F_ν by conjugating S_ν . Then we conjugate the group S_ν by the element t given by

$$t_{(x, \lambda)} = \begin{cases} \pi_{\nu-1}, & \text{if } x = \overline{1}_{\nu-2} \text{ and } \lambda = \nu - 1; \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Element t is in A by the induction assumption. Now we fix $f \in H_\nu$ and $g \in S_\nu$:

$$g_{(x, \lambda)} = \begin{cases} f, & \text{if } x = \overline{1}_{\nu-2} 2_{\nu-1} \text{ and } \lambda = \nu; \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Since $t(\overline{1}_{\nu-1}) = \overline{1}_{\nu-2} \pi_{\nu-1}(1_{\nu-1}) = \overline{1}_{\nu-2} 2_{\nu-1}$, we get

$$(tgt^{-1})_{(\overline{1}_{\nu-1}, \nu)} = t_{(\overline{1}_{\nu-1}, \nu)} g_{(t(\overline{1}_{\nu-1}), \nu)} t_{(g(t(\overline{1}_{\nu-1})), \nu)}^{-1} = g_{(\overline{1}_{\nu-2} 2_{\nu-1}, \nu)} = f.$$

Other projections of the element $(tgt^{-1})_{(x, \mu)}$ are trivial. In this way we can generate F_ν . So it is enough to generate S_ν .

We consider the following cases:

(1). We suppose that the group G_ν is abelian. For an arbitrary $f \in G_\nu$ we can choose a sequence $i_1, i_2, \dots, i_k$ such that $a_{i_1} a_{i_2} \dots a_{i_k} = (g_\mu)_{\mu \in \Lambda_1 \cap \Delta}$, where $g_\nu = f$ and g_μ is trivial for $\mu \in \Delta \setminus \{\nu\}$. Now we consider the product $\overline{a}_{i_1} \overline{a}_{i_2} \dots \overline{a}_{i_k}$. Let $x = (x_\delta)_{\delta > \mu} = \overline{1}_{\mu-2} 2_{\mu-1}$ for some $\mu \in \Lambda_1 \cap \Delta$. The definition of $\overline{a}_i$ implies that $\overline{a}_i(x) = ((\overline{a}_i)_{(\overline{1}_{\delta-1}, \delta)}(x_\delta))_{\delta > \mu} = (x_\delta)_{\delta > \mu} = x$. So $(\overline{a}_i \overline{a}_j)_{(x, \mu)} = (\overline{a}_i)_{(x, \mu)} (\overline{a}_j)_{(x, \mu)} = a_{i, \mu} a_{j, \mu}$. We have a similar situation for a more number of multipliers. Therefore $(\overline{a}_{i_1} \overline{a}_{i_2} \dots \overline{a}_{i_k})_{(x, \mu)} = f$ for $\mu = \nu$ and $x = \overline{1}_{\nu-2} 2_{\nu-1}$; projections are trivial for all other cases. Thus we can generate S_ν .

(2). Let $|\nu| = 1$ and G_ν be non-abelian. We choose t as follows

$$t_{(x,\lambda)} = \begin{cases} \pi_\lambda, & \text{if } x = \emptyset \text{ and } \lambda \neq \nu - 1; \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Let $q \in \langle \bar{q}_i, 1 \leq i \leq C \rangle$. We have $(tgt^{-1})_{(x,\lambda)} = t_{(x,\lambda)} q(t_{(x,\lambda)}) t_{(q(t(x)),\lambda)}^{-1}$. If $|\lambda| = 0$ and $\lambda \neq \nu - 1$ then $t(1_\lambda) = t_{(\emptyset,\lambda)}(1_\lambda) = \pi_\lambda(1_\lambda) = 2_\lambda$. Then

$$(tgt^{-1})_{(x,\lambda)} = \begin{cases} q_{(2_{\lambda-1},\lambda)}, & \text{if } |\lambda| = 1, x = 1_{\lambda-1} \text{ and } \lambda - 1 \neq \nu - 1; \\ q_{(2_{\nu-1},\lambda)}, & \text{if } |\lambda| = 1, x = 2_{\nu-1} \text{ and } \lambda - 1 = \nu - 1; \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

We choose an arbitrary $p \in \langle \bar{q}_i, 1 \leq i \leq C \rangle$. Then

$$\begin{aligned} & [(tgt^{-1}), p]_{(x,\lambda)} = \\ & = \begin{cases} [q_{(2_{\nu-1},\lambda)}, p_{(2_{\nu-1},\lambda)}], & \text{if } |\lambda| = 1, x = 2_{\nu-1} \\ & \text{and } \lambda - 1 = \nu - 1; \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases} \end{aligned}$$

Thus for an arbitrary $r = (r_\lambda)_{\lambda \in LN(\nu-1)} \in \prod_{\lambda \in LN(\nu-1)} G_\lambda'$ there exists $g \in A$ such that $g_{(x,\lambda)}$ is trivial for $x \neq 2_{\nu-1}$ and $g_{(2_{\nu-1},\lambda)} = r_\lambda$. Since $\prod_{\lambda \in LN(\nu-1)} G_\lambda' = (\prod_{\lambda \in LN(\nu-1)} G_\lambda)'$ then for an arbitrary $f \in H_\nu$ there exists g such that $d_{(x,\lambda)}$ is trivial for $x \neq 2_{\nu-1}$, $\lambda \neq \nu$ and $d_{(2_{\nu-1},\nu)} = f$ which gives us S_ν .

(3). Let $|\nu| > 1$ and G_ν be non-abelian. We consider the case when $|\nu|$ is even (the proof for the case when of odd $|\nu|$ is similar; we can just replace elements $\bar{b}_i$ by $\bar{h}_i$).

We denote

$$Y = \{\bar{1}_{\lambda-2}2_{\lambda-1}2_\lambda \mid \lambda \in \Delta, |\lambda| \geq 1, |\lambda| - |\nu| \text{ is odd}\}.$$

We choose two arbitrary elements d, g from a group $\langle b_i \mid 1 \leq i \leq C \rangle$ (from a group $\langle h_i \mid 1 \leq i \leq C \rangle$ if $|\nu|$ is odd). We note that if $d_{(x,\lambda)}$ is not trivial then $x \in Y$ (this is true for both cases of even and odd $|\nu|$).

We need to choose an element t such that

$$\begin{aligned} & [tdt^{-1}, g]_{(x,\lambda)} = \\ & = \begin{cases} [d_{(\bar{1}_{\nu-3}2_{\nu-2}2_{\nu-1},\lambda)}, g_{(\bar{1}_{\nu-3}2_{\nu-2}2_{\nu-1},\lambda)}], & \text{if } \lambda \in LN(\nu-1); \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases} \end{aligned} \quad (1)$$

We choose t using the induction assumption. The equality $(tdt^{-1})_{(x,\lambda)} = t_{(x,\lambda)} d_{(t(x),\lambda)} t_{(d(t(x)),\lambda)}^{-1}$

$$t_{(x,\lambda)} = \begin{cases} \pi_\lambda, & \text{if } x \text{ is the empty word, } |\nu| \text{ is odd} \\ & \text{and } \lambda \neq \nu - |\nu|; \\ \pi_\lambda, & \text{if } x = \bar{1}_{\nu-2}; \\ \pi_\lambda, & \text{if } x = \bar{1}_{\nu-n}1_{\lambda-1}, n \text{ is odd, } 3 \leq \\ & \leq n \leq |\nu| + 1 \text{ and } \lambda \neq \nu - n + 2; \\ \pi_\lambda^{-1}, & \text{if } x = \bar{1}_{\nu-n}2_{\lambda-1}, n \text{ is odd, } 3 \leq \\ & \leq n \leq |\nu| + 1 \text{ and } \lambda \neq \nu - 1; \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

In order to prove that t satisfies (1) it is enough to show that an arbitrary word from the set $t(Y) \setminus \{\bar{1}_{\nu-3}2_{\nu-2}2_{\nu-1}\}$ is not a prefix of a word from Y and an arbitrary word from the set $Y \setminus \{\bar{1}_{\nu-3}2_{\nu-2}2_{\nu-1}\}$ is not a prefix of a word from the set $t(Y)$. The word $\bar{1}_{\nu-3}2_{\nu-2}2_{\nu-1}$ must be contained in both sets. If $x = \bar{1}_{\nu-3}2_{\nu-2}2_{\nu-1}$ then $t(x) = x$. The proof goes as follows: fix some word $x \in Y \setminus \{\bar{1}_{\nu-3}2_{\nu-2}2_{\nu-1}\}$; compute $t(x)$; we show that $t(x)$ is not a prefix of a word from Y and arbitrary word from Y is not a prefix of $t(x)$. We choose λ and the smallest n such that x can be written as $x = \bar{1}_{\nu-n}1_{\lambda-|\lambda|+|\nu|-n+1} \dots 1_{\lambda-2}2_{\lambda-1}2_\lambda$. Then $n \leq |\nu| + 1$. We consider all possible cases for n .

Let $n \geq 3$, $|\lambda| = |\nu| - n + 2$ (then $x = \bar{1}_{\nu-n}2_{\lambda-1}2_\lambda$), $\lambda \neq \nu - 1$. Since $|\lambda| - |\nu|$ is odd, then n is odd. Then $t(x) = \bar{1}_{\nu-n}2_{\lambda-1}1_\lambda$. It is obvious that an element $t(x)$ is not a prefix of a word from Y and arbitrary word from Y is not a prefix of $t(x)$.

Let $n \geq 3$, $|\lambda| > |\nu| - n + 2$ (then $x = \bar{1}_{\nu-n}1 \dots 2_{\lambda-1}2_\lambda$), n is even. If $\bar{1}_{\nu-n}$ is the empty word then $n = |\nu| + 1$ and the number $|\nu|$ is odd in this case. We have $t(x) = \bar{1}_{\nu-n}2 \dots 2_{\lambda-1}2_\lambda$. It is obvious that an element $t(x)$ is not a prefix of a word from Y . Now we choose some word $y \in Y$ and assume that it is a prefix of $t(x)$. Then $y = \bar{1}_{\nu-n}2_{\mu-1}2_\mu$ for some μ . We have $|\mu| = |\nu| - n + 2$, where $|\mu| - |\nu| = -n + 2$ is even. Therefore $y \notin Y$.

Let $n \geq 3$, $|\lambda| > |\nu| - n + 2$ (then $x = \bar{1}_{\nu-n}1 \dots 2_{\lambda-1}2_\lambda$), n is odd. Since $|\lambda| - |\nu|$ is odd, then $|\lambda| - |\nu| + n$ is even. As $|\lambda| - |\nu| + n > 2$ then $|\lambda| - |\nu| + n \geq 4$ (therefore $x = \bar{1}_{\nu-n}1 \dots 1 \dots 2_{\lambda-1}2_\lambda$). Then $t(x) = \bar{1}_{\nu-n}1 \dots 2_{\lambda-1}2_\lambda$. It is obvious that an element $t(x)$ is not a prefix for some word in Y . Now we choose some word $y \in Y$ and assume that it is a prefix of $t(x)$. Then $y = \bar{1}_{\nu-n}1_{\mu-2}2_{\mu-1}2_\mu$ for some μ . We have $|\mu| = |\nu| - n + 3$, where $|\mu| - |\nu| = -n + 3$ is even. Therefore $y \notin Y$.

Let $n < 3$ (then $x = \overline{1_{\nu-2}} \dots 2_{\lambda-1} 2_{\lambda}$). Therefore $|\lambda| - |\nu - 2| \geq 2$. Since $|\lambda| - |\nu|$ is odd, then $|\lambda| - |\nu - 2|$ is odd and $|\lambda| - |\nu - 2| \geq 3$ (then $x = \overline{1_{\nu-2}} 1_{\nu-1} \dots 2_{\lambda-1} 2_{\lambda}$). Then $t(x) = \overline{1_{\nu-2}} 2_{\nu-1} \dots 2_{\lambda-1} 2_{\lambda}$. It is obvious that an element $t(x)$ is not a prefix of a word from Y . Now we choose some word $y \in Y$ and assume that it is a prefix of $t(x)$. Then $y = \overline{1_{\nu-2}} 2_{\mu-1} 2_{\mu}$ for some μ . Then $|\mu| = |\nu|$ and therefore $|\mu| - |\nu| = 0$ is even. Hence $y \notin Y$.

So the condition 1 holds. Therefore for an arbitrary $r = (r_{\lambda})_{\lambda \in LN(\nu-1)} \in \prod_{\lambda \in LN(\nu-1)} H_{\lambda}$ there exists $g \in A$ such that $g_{(x,\lambda)}$ is trivial for $x \neq \overline{1_{\nu-3}} 2_{\nu-2} 2_{\nu-1}$ and $g_{(\overline{1_{\nu-3}} 2_{\nu-2} 2_{\nu-1}, \lambda)} = r_{\lambda}$. Since $\prod_{\lambda \in LN(\nu-1)} G_{\lambda}' = (\prod_{\lambda \in LN(\nu-1)} G_{\lambda})'$ then for an arbitrary $f \in H_{\nu}$ there exists g such that $d_{(\overline{1_{\nu-3}} 2_{\nu-2} 2_{\nu-1}, \nu)} = f$ and $d_{(x,\lambda)}$ is trivial for other cases. To complete the proof we conjugate received element by the following element

$$(t)_{(x,\lambda)} = \begin{cases} \pi_{\nu-2}, & \text{if } x = \overline{1_{\nu-3}}, \lambda = \nu - 2; \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Then

$$(tdt^{-1})_{(x,\lambda)} = \begin{cases} f, & \text{if } x = \overline{1_{\nu-2}} 2_{\nu-1}, \lambda = \nu; \\ e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

We have shown how to generate S_{ν} what finishes the proof of the lemma. $\square$

Now we prove the main theorem.

Proof. For each $\lambda \in \Delta$ we define the group $\widehat{G}_{\lambda}$ as follows

$$(\widehat{G}_{\lambda})_{(x,\mu)} = \begin{cases} G_{\lambda}, & \text{if } x = \overline{1_{\lambda-2}} 2_{\lambda-1} \text{ and } \mu = \lambda; \\ \{e\}, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

By Lemma 5 from [9] it is enough to show that all groups $\widehat{G}_{\lambda}$ are contained in the group generated

by A . We fix $\nu \in \Delta$ and $g \in G_{\nu}$. If ν is a maximal element then we can generate the group $\widehat{G}_{\nu}$ using elements from the item (a). Now we consider the case when ν is not a maximal element. There exists $g' \in G_{\nu}/G_{\nu}'$ such that $g \in g'G_{\nu}'$. Now we choose a sequence $i_1, \dots, i_k$ such that $s'_{i_1, \nu} \cdot \dots \cdot s'_{i_k, \nu} = g'$ and $s'_{i_1, \lambda} \cdot \dots \cdot s'_{i_k, \lambda} = e$ in $\lambda \in \Delta \setminus \{\nu\}$. Then we consider the product $\bar{s} = \bar{s}_{i_1} \cdot \dots \cdot \bar{s}_{i_k}$. Let us compute $\bar{s}_i(\overline{1_{\lambda-2}} 2_{\lambda-1}) = ((\bar{s}_i)_{(\overline{1_{\mu-1}}, \mu)}(1_{\mu}))_{\mu > \lambda-1} (\bar{s}_i)_{(\overline{1_{\lambda-2}}, \lambda-1)}(2_{\lambda-1}) = \overline{1_{\lambda-2}} 2_{\lambda-1}$. Therefore

$$\begin{cases} \bar{s}_{(x,\lambda)} \in g'G_{\nu}', & \text{if } x = \overline{1_{\nu-2}} 2_{\nu-1} \text{ and } \lambda = \nu; \\ \bar{s}_{(x,\lambda)} \in G_{\lambda}', & \text{if } x = \overline{1_{\lambda-2}} 2_{\lambda-1} \text{ and } \lambda \neq \nu; \\ \bar{s}_{(x,\lambda)} = e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

By Lemma 1 for an arbitrary $\lambda \in \Delta \setminus \{\nu\}$ we can choose elements $w_{\lambda} \in A$ such that $(w_{\lambda})_{(\overline{1_{\lambda-2}} 2_{\lambda-1}, \lambda)} = (\bar{s}_{i_1} \cdot \dots \cdot \bar{s}_{i_k})_{(\overline{1_{\lambda-2}} 2_{\lambda-1}, \lambda)}^{-1} \in H_{\lambda}$. Then $(w_{\lambda})_{(\overline{1_{\lambda-2}} 2_{\lambda-1}, \lambda)} = (\bar{s})_{(\overline{1_{\lambda-2}} 2_{\lambda-1}, \lambda)}^{-1}$ and $(w_{\lambda})_{(x,\mu)}$ is trivial in the other case. We can also choose $w_{\nu} \in A$ such that $(w_{\nu})_{(\overline{1_{\nu-2}} 2_{\nu-1}, \nu)} = (\bar{s})_{(\overline{1_{\nu-2}} 2_{\nu-1}, \nu)}^{-1} g$ and $(w_{\nu})_{(x,\mu)}$ is trivial in the other case. Let $\Delta = \{\lambda_1, \dots, \lambda_{|\Delta|}\}$. Then we consider the product $w = w_{\lambda_1} \cdot \dots \cdot w_{\lambda_{|\Delta|}}$

$$\begin{cases} (w)_{(\overline{1_{\lambda-2}} 2_{\lambda-1}, \lambda)} = (\bar{s})_{(\overline{1_{\lambda-2}} 2_{\lambda-1}, \lambda)}^{-1}, & \lambda \in \Delta \setminus \{\nu\}; \\ (w)_{(\overline{1_{\nu-2}} 2_{\nu-1}, \nu)} = (\bar{s})_{(\overline{1_{\nu-2}} 2_{\nu-1}, \nu)}^{-1} g; \\ (w)_{(x,\mu)} = e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

The product $\bar{s}w$ is a required element:

$$\begin{cases} (\bar{s}w)_{(\overline{1_{\nu-2}} 2_{\nu-1}, \nu)} = g; \\ (\bar{s}w)_{(x,\mu)} = e, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Thus we can generate $\widehat{G}_{\nu}$ for any $\nu \in \Delta$. $\square$

Список використаних джерел

1. Behrendt G. Equivalence systems and generalized wreath / G. Behrendt products // Acta Sci. Math. — 1990. — **54**. — № 3-4. — P. 257-268.
2. Bondarenko I. V. Finite generation of iterated wreath products / I. V. Bondarenko // Arch. Math. — 2010. — **95**. — № 4. — P. 301-308.

References

1. BEHRENDT, G. (1990), "Equivalence systems and generalized wreath products" Acta Sci. Math., **v.54**, №3-4, pp. 257-268.
2. BONDARENKO, I. V. (2010), "Finite generation of iterated wreath products", Arch. Math., **v.95**, №4, pp. 301-308.

3. Detomi E. Characterization of finitely generated infinitely iterated wreath products / E. Detomi, A. Luccini // Forum Math. — 2011. — **25**. — № 4. — P.867–886.
4. Dixon M. R. Some properties of generalized wreath products / M. R. Dixon, T. A. Fournelle // Compositio Math. — 1984. — **52**. — P. 355–372.
5. Feinberg V. Z. Wreath product of permutation groups with respect to partially ordered sets and filters / V. Z. Feinberg // Vesci Akad. Navuk BSSR Ser. Fiz.-Mat. Navuk — 1971. — **6**. — P. 28–38.
6. Hall P. Wreath powers and characteristically simple groups / P. Hall // Proc. Cambridge Phil. Soc. — 1969. — **58**. — № 2. — P. 170–184.
7. Holland W. C. The Characterization of Generalized Wreath Products / W. C. Holland // J. Algebra — 1969. — **13**. — № 2. — P. 152–172.
8. Lavrenyuk Y. V. On wreath products over tree ordered sets / Y. V. Lavrenyuk, A. S. Oliynyk // Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Physics and Mathematics Series — 2007. — № 3. — P. 45–48.
9. Samoilovych I. O. On finite generation of wreath product by partially ordered set / I. O. Samoilovych // NaUKMA Academic Records. Physics and Mathematics Series — 2015. — **165**. — P. 29–34.
10. Silcock H. L. Generalized wreath products and the lattice of normal sub-groups of a group / H. L. Silcock // Algebra Universalis — 1977. — **7**. — № 1. — P. 361–372.
11. Wells C. Some applications of the wreath product construction / C. Wells // Amer. Math. Monthly — 1976. — **83**. — № 5. — P. 317–338.
3. DETOMI, E. and LUCCINI, A. (2011), "Characterization of finitely generated infinitely iterated wreath products", Forum Math., **v.25**, №4, pp.867–886.
4. DIXON, M. R. and FOURNELLE, T. A. (1984) "Some properties of generalized wreath products", Compositio Math., **v.52**, pp. 355–372.
5. FEINBERG, V. Z. (1971), "Wreath product of permutation groups with respect to partially ordered sets and filters", Vesci Akad. Navuk BSSR Ser. Fiz.-Mat. Navuk , **v.6**, pp. 28–38.
6. HALL, P. (1969), "Wreath powers and characteristically simple groups", Proc. Cambridge Phil. Soc., **v.58**, №2, pp. 170–184.
7. HOLLAND, W. C. (1969), "The Characterization of Generalized Wreath Products", J. Algebra, **v.13**, №2, pp. 152–172.
8. LAVRENYUK, Y. V. and OLIYNYK, A. S. (2007), "On wreath products over tree ordered sets", Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Physics and Mathematics Series, №3, pp. 45–48.
9. SAMOILOVYCH, I. O. (2015), On finite generation of wreath product by partially ordered set, NaUKMA Academic Records. Physics and Mathematics Series, **v.165**, pp. 29–34.
10. SILCOCK, H. L. (1977), "Generalized wreath products and the lattice of normal sub-groups of a group", Algebra Universalis, **v.7**, №1, pp. 361–372.
11. WELLS, C. (1976), "Some applications of the wreath product construction", Amer. Math. Monthly, **v.83**, №5, pp. 317–338.

Received: 25.04.2015

**ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ
РІВНЯННЯ,
МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА
ТА МЕХАНІКА**

УДК 539.3

Михайленко С. В.¹, к. ф.-м. н.

S. V. Mikhaylenko¹, Ph. D.

**Стационарні розв'язки рівняння
нелінійного осцилятора з
моногоармонічним збудженням**

**Stationary solutions of equations
for nonlinear oscillator with
anharmonic perturbation**

¹ Житомирський державний університет імені
Івана Франка, 10008, м. Житомир, вул. Велика
Бердичівська, 40
e-mail: s.mikhaylenko@ukr.net

¹ Ivan Franko State University of Zhytomyr, 10008,
Zhytomyr, Velyka Berdychivska Str., 40
e-mail: s.mikhaylenko@ukr.net

Пропонується метод побудови стаціонарних розв'язків рівняння, що описує поведінку осцилятора з лінійною дисипативною і квадратично-нелінійною консервативною характеристиками при моногоармонічному навантаженні.

Ключові слова: нелінійний осцилятор, коефіцієнти Фур'є, моногоармонічне навантаження, стаціонарні коливання, гармонічний баланс.

Stationary solutions of equations that describe the behavior of oscillator with a linear dissipative characteristic and a quadratic nonlinear conservative characteristic in a monoharmonic load are studied. The method is based on the representation of complex Fourier coefficients as functions of components of the complex loading amplitude. A general view of these functions appears when their invariance conditions regarding conversion shift over time are used. As a result, each complex Fourier coefficient is represented as the product of some complex value function of the square amplitude by the appropriate degree of the complex loading amplitude. This presentation of Fourier coefficients makes it possible to reduce an infinite system of equations of harmonic balance regarding the Fourier coefficients to the infinite system of equations regarding unknown functions of square of the loading amplitude. This system enables the construction of solutions in the form of series in even powers of the loading amplitude. The first approximation formula of the stationary solution of oscillator equation takes into account those terms of the complex Fourier series, which absolute values contain as the factors the loading amplitude degrees that are no greater than three. Each subsequent approximation specifies the complex harmonic amplitude of the previous approximation by using higher degrees of the loading amplitude, and two new harmonics are appeared.

Key Words: nonlinear oscillator, Fourier coefficient, monoharmonic load, stationary vibrations, harmonic balance.

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

**1. Рівняння нелінійного осцилятора і
система гармонічного балансу**

Рівняння осцилятора з лінійною дисипативною і квадратично-нелінійною консервативною характеристиками при моногоармонічному навантаженні має вигляд [1,2]:

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\tau^2} + \delta_0 \frac{d\varepsilon}{d\tau} + \varepsilon - (f_1' \cos \vartheta\tau - f_1'' \sin \vartheta\tau) =$$
$$= -d_0 \varepsilon^2, \tau > 0,$$
(1)

де $\delta_0, \vartheta, f_1', f_1'', d_0 = \text{const}$, причому $\delta_0 > 0, \vartheta > 0, d_0 \neq 0$.

У механіці, наприклад, таким осцилятором є стержень, один кінець якого закріплений, а інший з'єднаний з масою M . Матеріал стержня описується моделлю Фойгта з квадратичною пружністю і лінійною в'язкістю. Маса збуджується силою

$$F = F' \cos \omega t - F'' \sin \omega t.$$

Рівняння (1) дістаємо з системи рівнянь

$$M \frac{d^2 u}{dt^2} = F - \sigma S, \varepsilon = \frac{u}{l},$$

$$\sigma = E(\varepsilon + d_0 \varepsilon^2) + \eta \frac{d\varepsilon}{dt}$$

шляхом уведення безрозмірних параметрів

$$\vartheta = \frac{\omega}{\omega_0}, \tau = \omega_0 t, \delta_0 = \frac{\eta \omega_0}{E},$$

$$f_1' = \frac{F'}{SE}, f_1'' = \frac{F''}{SE},$$

$$\text{де } \omega_0^2 = \frac{SE}{ML}.$$

Вище також позначено: u - зміщення маси, σ - механічне напруження, S - площа поперечного перерізу стержня, ε - деформація стержня, l - його довжина, E - модуль Юнга, η - коефіцієнт в'язкості, d_0 - коефіцієнт нелінійності.

Періодичні розв'язки рівняння (1) шукаємо у вигляді ряду Фур'є

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{\varepsilon_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [\varepsilon_n' \cos n\vartheta\tau + \varepsilon_n'' \sin n\vartheta\tau] = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{\varepsilon}_n e^{in\vartheta\tau}. \end{aligned} \quad (2)$$

Тут

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_n &= \varepsilon_n' + i\varepsilon_n'', i = \sqrt{-1}, n \geq 1; \\ \tilde{\varepsilon}_{-n} &= \overline{\tilde{\varepsilon}_n}; \tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0. \end{aligned} \quad (3)$$

Риска зверху означає комплексно-спряжену величину.

Якщо підставити (2) в (1), увівши позначення

$$\tilde{\theta}_n = 1 - (n\vartheta)^2 + i\delta_0 n\vartheta, \tilde{f}_1 = f_1' + if_1'', \quad (4)$$

дістанемо

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{\theta}_n \tilde{\varepsilon}_n e^{in\vartheta\tau} - (\tilde{f}_1 e^{-i\vartheta\tau} + \tilde{f}_1 e^{i\vartheta\tau}) = \\ = -\frac{d_0}{2} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \tilde{\varepsilon}_k \tilde{\varepsilon}_l e^{i(k+l)\vartheta\tau}. \end{aligned} \quad (5)$$

Помножимо ліву та праву частини (5) на $\frac{9}{2\pi} e^{-in\vartheta\tau}$ і проінтегруємо по τ від 0 до $\frac{2\pi}{9}$. Після необхідних викладок дістанемо нескінченну систему нелінійних рівнянь відносно коефіцієнтів $\tilde{\varepsilon}_n, n \geq 0$ з (2)

$$\begin{aligned} \tilde{\theta}_n \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{f}_n = -d_0 \left[\frac{1}{2} \sum_{k=0}^n \tilde{\varepsilon}_k \tilde{\varepsilon}_{n-k} + \sum_{k=1}^{\infty} \overline{\tilde{\varepsilon}_k} \tilde{\varepsilon}_{n+k} \right], \quad (6) \\ n = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned}$$

де $\tilde{f}_n = 0$, якщо $n \neq 1$.

2. Зображення коефіцієнтів Фур'є

Величина ε з (2) є стаціонарною реакцією осцилятора на моногармонічне навантаження

$$f_1(\tau) = f_1' \cos \vartheta\tau - f_1'' \sin \vartheta\tau \quad (7)$$

з частотою ϑ і амплітудою навантаження

$$|f_1| = \sqrt{f_1'^2 + f_1''^2}.$$

Очевидно, що коефіцієнти в (2) є деякими функціями величин f_1', f_1''

$$\tilde{\varepsilon}_n = \tilde{F}_n(f_1', f_1''), n = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

Ці функції мають бути інваріантними відносно перетворення зсуву у часі, а саме, у разі заміни в (7) і (2) τ на $\tau + \Delta\tau$

$$\begin{aligned} f_1(\tau + \Delta\tau) &= (f_1' \cos \varphi - f_1'' \sin \varphi) \cos \vartheta\tau - \\ &- (f_1' \sin \varphi + f_1'' \cos \varphi) \sin \vartheta\tau, \end{aligned}$$

$$\varepsilon(\tau + \Delta\tau) = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{\varepsilon}_n e^{in\varphi} e^{in\vartheta\tau},$$

де $\varphi = \vartheta\Delta\tau$, і введення позначень

$$x = f_1' \cos \varphi - f_1'' \sin \varphi, y = f_1' \sin \varphi + f_1'' \cos \varphi \quad (9)$$

мають виконуватись рівності

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_n e^{in\varphi} &= \tilde{F}_n(x, y) \text{ або} \\ \tilde{\varepsilon}_n &= \tilde{F}_n(x, y) e^{-in\varphi}, n = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (10)$$

де $\tilde{F}_n$ - ті самі функції, що й у (8).

Шляхом виключення параметра φ з другого співвідношення (10) дістанемо рівняння

$$\frac{\partial \tilde{\varepsilon}_n}{\partial f_1'} f_1'' - \frac{\partial \tilde{\varepsilon}_n}{\partial f_1''} f_1' + in \tilde{\varepsilon}_n = 0,$$

загальний розв'язок якого має вигляд

$$\tilde{\varepsilon}_n = \tilde{E}_n(|f_1|^2) \tilde{f}_1^n, n = 0, 1, 2, \dots, \quad (11)$$

де $\tilde{E}_0$ - довільна дійсна, а $\tilde{E}_1, \tilde{E}_2, \dots$ - довільні комплекснозначні функції квадрата амплітуди навантаження.

Якщо в (6) скористатись представленням (11), то після скорочення на $\tilde{f}_1^n$ дістанемо нескінченну систему рівнянь відносно величин $\tilde{E}_n$

$$\begin{aligned} \tilde{\theta}_n \tilde{E}_n - \eta_n = -d_0 \left[\frac{1}{2} \sum_{k=0}^n \tilde{E}_k \tilde{E}_{n+k} + \right. \\ \left. + \sum_{k=1}^{\infty} \overline{\tilde{E}_k} \tilde{E}_{n+k} |f_1|^{2k} \right], n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (12)$$

Тут $\eta_1 = 1$ і $\eta_n = 0$, якщо $n \neq 1$.

3. Розв'язання системи рівнянь (12)

Розв'язки системи (12) шукаємо у вигляді

$$\tilde{E}_n = \tilde{E}_n^{(0)} + \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{\alpha}_n^{(j)} |f_1|^{2j}, n = 0, 1, 2, \dots \quad (13) \quad \text{зокрема}$$

Якщо підставити (13) у (12) і зібрати коефіцієнти при однакових степенях амплітуди навантаження, то можна показати, що:

а) для величини $\tilde{E}_0^{(0)}$ можливі два значення

$$\tilde{E}_0^{(0)} = 0 \quad \text{та} \quad \tilde{E}_0^{(0)} = -\frac{2}{d_0}; \quad (14) \quad \text{і т.д.}$$

б) кожна наступна величина $\tilde{E}_n^{(0)}$ визначається попередніми за формулою

$$\begin{aligned} \tilde{E}_n^{(0)} = & \frac{1}{\tilde{\theta}_n + d_0 \tilde{E}_0^{(0)}} (\eta_n - \\ & - \frac{d_0}{2} \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{E}_k^{(0)} \tilde{E}_{n-k}^{(0)}), n \geq 1 \end{aligned} \quad (15)$$

(тут і нижче знак суми $\sum$ береться до уваги лише в тому разі, коли число над цим знаком не менше числа, що стоїть під ним), так

$$\begin{aligned} \tilde{E}_1^{(0)} = & \frac{1}{\tilde{\theta}_1 + d_0 \tilde{E}_0^{(0)}}, \\ \tilde{E}_2^{(0)} = & -\frac{d_0 (\tilde{E}_1^{(0)})^2}{2(\tilde{\theta}_2 + d_0 \tilde{E}_0^{(0)})}, \\ \tilde{E}_3^{(0)} = & -\frac{d_0 \tilde{E}_1^{(0)} \tilde{E}_2^{(0)}}{\tilde{\theta}_3 + d_0 \tilde{E}_0^{(0)}} \end{aligned} \quad (16)$$

і т.д.

в) коефіцієнти $\tilde{\alpha}_n^{(j)}$ знаходяться послідовно за формулою

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_n^{(j)} = & -\frac{d_0}{\tilde{\theta}_n + d_0 \tilde{E}_0^{(0)}} \left(\sum_{k=0}^{n-1} \tilde{\alpha}_k^{(j)} \tilde{E}_{n-k}^{(0)} + \right. \\ & + \tilde{E}_j^{(0)} \tilde{E}_{n+j}^{(0)} + \sum_{i=1}^{j-1} \left[\frac{1}{2} \sum_{k=0}^n \tilde{\alpha}_k^{(j-i)} \tilde{\alpha}_{n-k}^{(i)} + \right. \\ & + \tilde{\alpha}_i^{(j-i)} \tilde{E}_{n+i}^{(0)} + \tilde{\alpha}_{n+1}^{(j-i)} \tilde{E}_i^{(0)} \left. \right] + \\ & + \sum_{i=1}^{j-2} \sum_{k=1}^{j-i-1} \tilde{\alpha}_k^{(j-i-k)} \tilde{\alpha}_{n+k}^{(i)}, \\ & n \geq 0, j \geq 1 \end{aligned} \quad (17)$$

у порядку збільшення j , так

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_n^{(1)} = & -\frac{d_0}{\tilde{\theta}_n + d_0 \tilde{E}_0^{(0)}} \left(\sum_{k=0}^{n-1} \tilde{\alpha}_k^{(1)} \tilde{E}_{n-k}^{(0)} + \right. \\ & + \tilde{E}_1^{(0)} \tilde{E}_{n+1}^{(0)} \left. \right), n = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned}$$

$$\tilde{\alpha}_0^{(1)} = -\frac{d_0 |\tilde{E}_1^{(0)}|^2}{1 + d_0 \tilde{E}_0^{(0)}}, \quad (18)$$

$$\tilde{\alpha}_1^{(1)} = -\frac{d_0}{\tilde{\theta}_1 + d_0 \tilde{E}_0^{(0)}} (\tilde{\alpha}_0^{(1)} \tilde{E}_1^{(0)} + \tilde{E}_1^{(0)} \tilde{E}_2^{(0)})$$

Коефіцієнти $\tilde{E}_n^{(0)}, \tilde{\alpha}_n^{(j)}$ з (13) визначаються формулами (15), (17) однозначно. Фактично можна будувати два розв'язки системи (12) залежно від того, якого значення (14) набуває величина $\tilde{E}_0^{(0)}$.

4. Побудова стаціонарного розв'язку рівняння (1)

Назвемо $\tilde{E}_n^{(0)}$ нульовим, а

$$\tilde{E}_n^{(k)} = \tilde{E}_n^{(0)} + \sum_{j=1}^k \tilde{\alpha}_n^{(j)} |f_1|^{2j}, n = 0, 1, 2, \dots \quad (19)$$

k -им наближенням розв'язку системи (12), $k = 0, 1, 2, \dots$.

Якщо скористатись (19) у виразах для комплексних амплітуд (11), а потім у сумі (2), яку перепишемо у вигляді

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_0}{2} + \operatorname{Re} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{\varepsilon}_n e^{in\theta\tau},$$

де Re – дійсна частина, то немає сенсу утримувати в цій сумі доданки, абсолютні величини яких містять як множники $|f_1|^{2k+2}$ і вищі степені амплітуди навантаження.

У результаті з умови $2j + n \leq 2k + 1$ дістанемо

$$\begin{aligned} \varepsilon = & \frac{1}{2} (\tilde{E}_0^{(0)} + \sum_{j=1}^k \tilde{\alpha}_0^{(j)} |f_1|^{2j}) + \\ & + \operatorname{Re} \left\{ \sum_{n=1}^{2k+1} (\tilde{E}_n^{(0)} + \right. \\ & + \sum_{j=1}^{[k-\frac{n-1}{2}]} \tilde{\alpha}_n^{(j)} |f_1|^{2j} \tilde{f}_1^n e^{in\theta\tau} \left. \right\} \end{aligned} \quad (20)$$

де $[k - \frac{n-1}{2}]$ - ціла частина.

Назвемо (20) k -им наближенням періодичного (стаціонарного) розв'язку рівняння (1). Згідно з (14) таких розв'язків два.

Як приклад, запишемо формулу 1-го наближення для випадку $\tilde{E}_0^{(0)} = 0$.

Згідно з (16), (18)

$$\begin{aligned}\tilde{E}_1^{(0)} &= \frac{1}{\tilde{\theta}_1}, \tilde{E}_2^{(0)} = -\frac{d_0}{2\tilde{\theta}_2\tilde{\theta}_1^2}, \\ \tilde{E}_3^{(0)} &= \frac{d_0^2}{2\tilde{\theta}_3\tilde{\theta}_2\tilde{\theta}_1^3}, \\ \tilde{\alpha}_0^{(1)} &= -\frac{d_0}{|\tilde{\theta}_1|^2}, \tilde{\alpha}_1^{(1)} = \frac{d_0^2}{\tilde{\theta}_1^2|\tilde{\theta}_1|^2} \left(1 + \frac{1}{2\tilde{\theta}_2}\right)\end{aligned}\quad (21)$$

Якщо в (20) взяти $k=1$ і скористатись виразами (21), дістанемо

$$\begin{aligned}\varepsilon &= -\frac{d_0}{2|\tilde{\theta}_1|^2}|f_1|^2 + \\ &+ \operatorname{Re}\left\{\left(\frac{1}{\tilde{\theta}_1} + \frac{d_0^2|f_1|^2}{\tilde{\theta}_1^2|\tilde{\theta}_1|^2}\left(1 + \frac{1}{2\tilde{\theta}_2}\right)\right)\tilde{f}_1 e^{i9\tau} - \right. \\ &\left. - \frac{d_0}{2\tilde{\theta}_2\tilde{\theta}_1^2}\tilde{f}_1^2 e^{i29\tau} + \frac{d_0^2}{2\tilde{\theta}_3\tilde{\theta}_2\tilde{\theta}_1^3}\tilde{f}_1^3 e^{i39\tau}\right\}\end{aligned}$$

На закінчення відмітимо, що з кожним наступним наближенням стаціонарного розв'язку рівняння (1) уточнюються комплексні амплітуди гармонік попереднього наближення і з'являються дві нові гармоніки.

Список використаних джерел

1. Боголюбов Н.Н. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний / Н.Н.Боголюбов, Ю.А.Митропольский. – Москва: Наука, 1974. – 504 с..
2. Карнаухов В. Г. Термомеханическое поведение вязкоупругих тел при гармоническом нагружении / В.Г.Карнаухов, И.К.Сенченков, Б.П.Гуменюк – Киев: Наукова думка, 1985. – 288 с

5. Висновки

Запропоновано метод знаходження стаціонарних розв'язків рівняння, що описує поведінку осцилятора з лінійною дисипативною і квадратично-нелінійною консервативною характеристиками при моногармонічному навантаженні

Метод ґрунтується на зображеннях комплексних коефіцієнтів Фур'є як функцій складових комплексної амплітуди навантаження. Загальний вигляд цих функцій з'ясовується з використанням умови їхньої інваріантності відносно перетворення зсуву у часі. У результаті кожен комплексний коефіцієнт Фур'є зображується як добуток деякої комплекснозначної функції квадрата амплітуди навантаження на відповідний степінь комплексної амплітуди навантаження. Таке представлення коефіцієнтів Фур'є дає можливість звести нескінченну систему рівнянь гармонічного балансу відносно коефіцієнтів Фур'є до нескінченної системи рівнянь відносно невідомих функцій квадрата амплітуди навантаження. Ця система допускає побудову розв'язків у вигляді рядів за парними степенями амплітуди навантаження.

Формулою першого наближення стаціонарного розв'язку рівняння осцилятора враховуються ті члени комплексного ряду Фур'є, абсолютні величини яких містять як множники степені амплітуди навантаження не вище третього. Тим самим враховуються нульова і перші три гармоніки. З кожним наступним наближенням уточнюються комплексні амплітуди гармонік попереднього наближення шляхом врахування вищих степенів амплітуди навантаження, і з'являються дві нові гармоніки.

References

1. BOGOLYUBOV N.N. & MITROPOLSKIJ Y.A.(1974) *Asimptoticheskiye metody v teorii nelineynyh kolebaniy* – Moskva: Nauka.
2. KARNAUKHOV V. G., SENCHENKOV I. K. & GUMENYUK B.P. (1985) *Termomekhanicheskoye povedeniye vyazkoupругih tel pry garmonicheskoye nagruzenii..* Kiev: Naukova Dumka.

Надійшла до редколегії 22.09.15

УДК 539.3

Опанасович¹ В. К., д.ф.-м.н., доц.,
Слободян¹ М. С., к.ф.-м.н., доц.,
Бедрий¹ В. Я., аспірант

**Двовісний згин ізотропної пластини з
прямокутною жорсткою шайбою та
прямолінійною наскрізною тріщиною з
урахуванням ширини області контакту
її берегів**

¹Львівський національний університет імені
Івана Франка, вул. Університетська, 1, Львів,
79000, Україна, e-mail: slob@yandex.ua

Opanasovich¹ V. K., Dr. Sci., Assoc. Prof.,
Slobodyan¹ M. S., PhD, Assoc. Prof.,
Bedriy¹ V. Y., graduate student

**Biaxial bending of an isotropic plate with
rectangular rigid washer and rectilinear
cross-cutting crack with account of width of
contact area between it's edges**

¹Ivan Franko National University of Lviv,
1, Universytetska St., Lviv, 79000, Ukraine,
email: slob@yandex.ua

Сформульовано і розв'язано задачу про двосторонній згин нескінченної ізотропної пластини, що містить прямокутне жорстке включення та наскрізну прямолінійну тріщину, береги якої контактують по області постійної ширини. Зроблено аналіз впливу навантаження, взаємного розташування включення та тріщини на коефіцієнти інтенсивності моментів та зусиль, критичне навантаження та контактне зусилля між берегами тріщини.

Ключові слова: прямолінійна тріщина, шайба, згин, ізотропна пластинка, комплексні потенціали, контакт берегів, контактне зусилля.

The problem of bending of isotropic plates with rigid rectangular inclusion and crack is solved with taking account of width of contact area between edges. Solution of the problem is presented as the combination of solutions of two auxiliary problems: (i) elastic plane stress problem and (ii) bending problem, which is attacked with the making use of classical theory of bending plates. To construct the solution of both the plane problem and bending problem, the complex potentials are introduced as a sum of correspondent complex potentials for inclusion and crack. Having used the known expressions that determine the stress-strain state of the plate through the complex potentials and satisfying the boundary conditions for both crack and inclusion, the singular integral equations are obtained. Making the unknown functions and variables dimensionless, the final system of singular integral equations with unknown complex functions and constants is derived. The resulting system of singular integral equations is reduced to a system of linear algebraic equations by the quadrature method based on complex function values. The system is solved numerically. Analysis of the contact force between the crack edges, intensity factors and critical loads for different values of parameters are performed.

Key words: linear crack, inclusion, bending, isotropic plate, complex potentials, contact shores, the contact force.

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

1. Вступ

У процесі виготовлення чи експлуатації пластин в них виникати дефекти типу тріщин та з конструктивних міркувань вони можуть містити прямокутні включення значно жорсткіші за саму пластину. Виникає питання про вплив жорсткого включення та тріщин на напружено-деформований стан пластини. Методи визначення напружено-деформованого стану у вершинах тріщин у тонких пластинах наведено в

роботах [1-5]. Згин пластини з абсолютно жорстким круговим включенням та тріщиною, береги якої контактують, розглянуто в роботі [6].

2. Формулювання задачі

Дослідимо задачу про двовісний згин безмежної ізотропної пластини завтовшки $2h$ з прямолінійною наскрізною тріщиною завдовжки $2l$ та жорсткою прямокутною шайбою розмірами $2a \times 2b$. У серединній площині пластини виберемо декартову систему координат $Ox\eta z$ з

початком у центрі включення, направивши вісь Ox паралельно до однієї з сторін прямокутника вздовж тріщини, а вісь Oz – перпендикулярно до серединної площини пластини. На нескінченності пластина згинається рівномірно розподіленими моментами M_x^∞ і M_y^∞ , завдяки яким береги тріщини приходять у гладкий контакт поблизу верхньої основи пластини по області сталої ширини h_1 . Через контакт берегів тріщини задачу розбиваємо на дві взаємозв'язані задачі: плоску задачу теорії пружності і задачу згину пластини з використанням класичної теорії. Лінію осі Ox , на якій розміщена тріщина, позначимо через L , а контур прямокутного жорсткого включення – через L_1 (див. рис. 1).

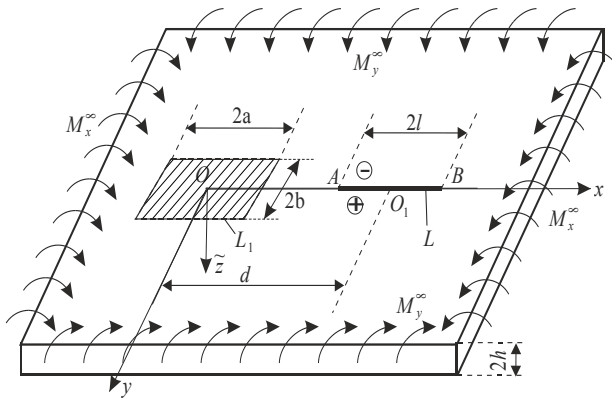


Рис. 1. Схема навантаження пластини та розміщення тріщин

Задача розв'язана за таких крайових умов: на тріщині [7]

$$M_y = \beta h N, \partial_x [v] + \alpha h [\partial_{xy}^2 w] = 0, x \in L, \\ \sigma_{yy}^\pm = -N / (2h), \sigma_{xy}^\pm = 0, P^\pm = 0, M_y^\pm = M_y, x \in L; \quad (1)$$

на межі прямокутної жорсткої шайби

$$u = 0, v = 0, w = 0, \partial w / \partial n = 0, s \in L_1; \quad (2)$$

де N – контактне зусилля між берегами тріщини, σ_{yy} і σ_{xy} – нормальні і дотичні напруження, u, v – компоненти вектора переміщення відповідно по осі Ox та Oy у плоскій задачі; M_y – згинальний момент, P – узагальнена в сенсі Кірхгофа перерізувальна сила, w – прогин пластини у задачі згину, $[f] = f^+ - f^-$, знаками “+” і “-” позначено граничне значення відповідної величини при $y \rightarrow \pm 0$, $\alpha = (1 + (1 - \gamma)^2) / 2$, $\beta = 1 - \gamma / 3$, $\gamma = h_1 / h$.

3. Розв'язок задачі

З використанням комплексних потенціалів плоскої задачі [1] та задачі згину [2], розв'язок задачі зведений до задач лінійного спряження, на основі яких отримано систему сингулярних інтегральних рівнянь відносно невідомих функцій $Q(u)$, $Q_1(u)$, $G(u)$, $G_1(u)$ та дійсної сталої C'_0 :

$$\begin{aligned} & \operatorname{Im} \left\{ \frac{2}{\pi} \int_L \frac{Q(u) du}{u-x} + \int_{L_1} (K_1(u, x) Q_1(u) du + \right. \\ & \left. + K_2(u, x) \overline{Q_1(u)} d\bar{u}) \right\} = 0, \operatorname{Im} \left\{ a_1 \int_L \frac{G(u) du}{u-x} + \right. \\ & \left. + \int_{L_1} (K_3(u, x) G_1(u) du + K_4(u, x) \overline{G_1(u)} d\bar{u}) \right\} = C'_0, x \in L, \\ & a_2 + a_1 \int_L \frac{G(u) du}{u-x} + \int_{L_1} (K_3(u, x) G_1(u) du + \\ & + K_4(u, x) \overline{G_1(u)} d\bar{u}) = -\beta h \left\{ \frac{2}{\pi} \int_L \frac{Q(u) du}{u-x} + \right. \\ & \left. + \int_{L_1} (K_1(u, x) Q_1(u) du + K_2(u, x) \overline{Q_1(u)} d\bar{u}) \right\}, x \in L, \\ & \operatorname{Re} Q(x) + \tilde{\alpha} \operatorname{Re} G(x) = 0, x \in L, \quad (3) \\ & \int_L [L_1(u, t) Q(u) + L_2(u, t) \overline{Q(u)}] du + \\ & + \int_{L_1} [M_1(u, t) Q_1(u) du + M_2(u, t) \overline{Q_1(u)} d\bar{u}] = 0, \\ & \int_L [L_3(u, t) G(u) du + L_4(u, t) \overline{G(u)} d\bar{u}] + \\ & + \int_{L_1} [M_3(u, t) G_1(u) du + M_4(u, t) \overline{G_1(u)} d\bar{u}] = -\tilde{D}, t \in L_1, \\ & \int_L Q(u) du = 0, \int_L G(u) du = 0, \operatorname{Im} \left\{ \int_L u G(u) du \right\} = 0, \\ & M_1(u, t) = \frac{k}{2\pi} \left(\frac{1}{u-t} - \frac{\bar{d}t}{dt} \frac{1}{\bar{u}-\bar{t}} \right), \\ & M_2(u, t) = \frac{1}{2\pi} \left(-\frac{1}{\bar{u}-\bar{t}} - \frac{\bar{d}t}{dt} \frac{t-u}{(\bar{u}-\bar{t})^2} \right), \\ & L_1(u, t) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{k}{u-t} - \frac{\bar{d}t}{dt} \frac{1}{u-\bar{t}} \right), \tilde{D} = 2\tilde{\Gamma} + \frac{\bar{d}t}{dt} \tilde{\Gamma}', \\ & L_2(u, t) = \frac{1}{2\pi} \left(-\frac{1}{u-\bar{t}} - \frac{\bar{d}t}{dt} \frac{t-u}{(u-\bar{t})^2} \right), \\ & M_4(u, t) = -M_2(u, t), L_4(u, t) = -L_2(u, t), \end{aligned}$$

$$M_3(u, t) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{u-t} + \frac{\overline{dt}}{dt} \frac{1}{\bar{u}-\bar{t}} \right),$$

$$L_3(u, t) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{u-t} - \frac{\overline{dt}}{dt} \frac{\tilde{k}}{u-\bar{t}} \right), \quad a_1 = \frac{m\tilde{k}}{\pi},$$

$$K_1(u, x) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{u-x} - \frac{k}{\bar{u}-x} \right), \quad K_2(u, x) = \frac{\bar{u}-u}{\pi(\bar{u}-x)^2},$$

$$K_3(u, x) = \frac{m}{2\pi} \left(\frac{\tilde{k}}{u-x} - \frac{1}{\bar{u}-x} \right), \quad \tilde{k} = \frac{3+\nu}{1-\nu},$$

$$K_4(u, x) = \frac{m}{2\pi} \left(\frac{u-\bar{u}}{(\bar{u}-x)^2} \right), \quad k = \frac{3-\nu}{1+\nu}, \quad i^2 = -1,$$

$$D = \frac{2Eh^3}{3(1-\nu^2)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad m = -D(1-\nu),$$

$$\tilde{\Gamma} = -\frac{M_x^\infty + M_y^\infty}{4D(1+\nu)}, \quad \tilde{\Gamma}' = \frac{M_x^\infty - M_y^\infty}{2D(1-\nu)}, \quad \tilde{\alpha} = 2\mu\alpha h \frac{1+\nu}{1-\nu},$$

$$a_2 = m(\tilde{\Gamma}(\tilde{k}-1) - \tilde{\Gamma}'), \quad Q(x) = -\frac{2i\mu}{1+k} \partial_x [u + iv],$$

$$G(x) = -i(1+\tilde{k})^{-1} \left[\partial_x (\partial_x w + i\partial_y w) \right],$$

E – модуль Юнга; ν – коефіцієнт Пуассона.

Коефіцієнти інтенсивності моментів (КИМ)
 $K = K_1 - iK_2$ та зусиль (КІЗ) $k = k_1 - ik_2$ можна
обчислити за формулами [3]

$$k^\pm = \mp h \lim_{x \rightarrow \pm l} (f(x) Q(x)), \quad f(x) = \sqrt{(l^2 - x^2)/l},$$

$$K^\pm = \mp 4Eh^3 (3+\nu) (3(1-\nu^2))^{-1} \lim_{x \rightarrow \pm l} (f(x) G(x)).$$

Критичний момент $\tilde{M}$ старту росту тріщини в
нашому випадку визначимо за формулою [6]

$$\tilde{M} = \frac{M_y^\infty}{2h^2} \sqrt{\frac{\pi l}{2\gamma_* E}} = \frac{(3+\nu) \min\{K_1\}^{-1}}{\sqrt{3(1+\nu)(3\alpha^2(1+\nu)+3+\nu)}},$$

де γ_* – густина ефективної поверхневої енергії
матеріалу пластини.

4. Числовий аналіз

Числовий аналіз проведено при $\gamma = 0,13$ [7],
 $\nu = 0,3$.

Систему сингулярних інтегральних рівнянь (3)
розв'язуємо за допомогою методу механічних
квадратур [5], скориставшись конформним
відображенням зовнішності прямокутника на
зовнішність одиничного кола

$$z = x + iy = \omega(\varepsilon) = R \left(\varepsilon + \sum_{k=1}^n c_k \varepsilon^{-k} \right), \quad c_{2l} = 0, \quad R > 0,$$

$$a = R \left(1 + \sum_{k=1}^n c_{2k-1} \right), \quad b = R \left(1 + \sum_{k=1}^n (-1)^k c_{2k-1} \right), \quad (4)$$

$$\frac{a}{l} = \frac{R}{l} \left(1 + \sum_{k=1}^n c_{2k-1} \right), \quad \varepsilon = e^{i\theta}, \quad R > 0,$$

де R – дійсне число, c_k – відомі сталі, значення
яких наведено в [4].

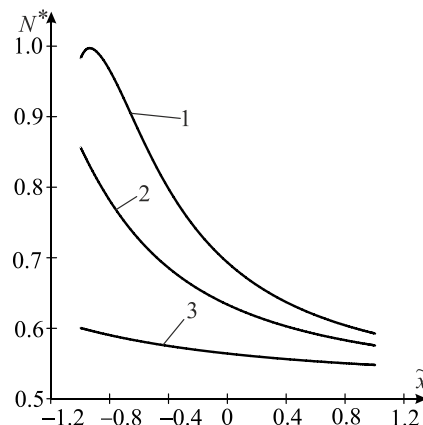


Рис. 2. Графічна залежність зведеного
контактного зусилля при різних $\tilde{x} = d/l$

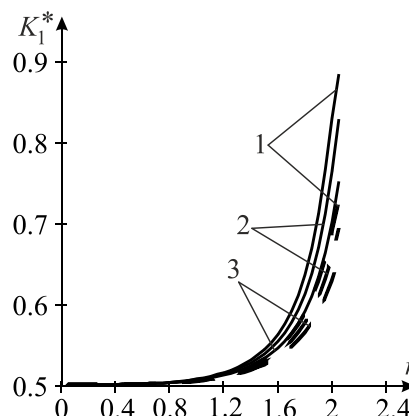


Рис. 3. Графічна залежність зведених
коефіцієнтів інтенсивності моментів від $r = R/l$

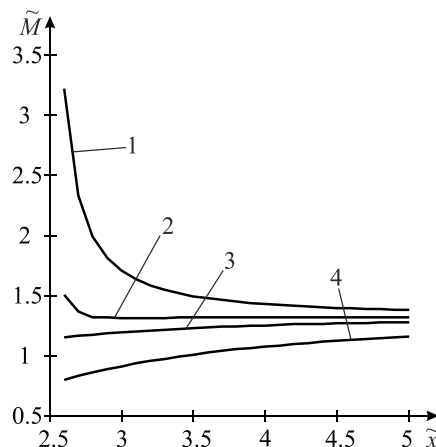


Рис. 4. Графічна залежність критичного моменту
від $\tilde{x} = d/l$

На рис. 2 подано графічну залежність зведеного контактного зусилля $N^* = hN/M_y^\infty$ між берегами тріщини від безрозмірної координати $\xi = x/l$ при $\chi = M_x^\infty / M_y^\infty = 1$, $a/b = 2$, $a/l = 2$, причому кривим 1, 2, 3 відповідає відповідно $\tilde{x} = d/l = 2; 2,5; 4$. Величина зведеного контактного зусилля N^* в ближній вершині A ($\xi = -1$) є більшою, ніж у дальній вершині B ($\xi = 1$).

На рис. 3 наведено графічні залежності зведених коефіцієнтів інтенсивності моментів (КІМ) $K_1^* = K_1 / (M_y^\infty \sqrt{l})$ в залежності від відносного розміру включення $r = R/l$ при $a/b = 7$, $\chi = 1$. Криві 1-3 побудовані при $\tilde{x} = d/l = 8,1; 8,5; 9$ відповідно, причому суцільні лінії відповідають КІМ у ближній до включення вершині тріщини, штрихові – у дальній. Як видно з рис. 3 КІМ у ближній вершині більший ніж у дальній.

Список використаних джерел

1. Мухелишвили Н. И. Некоторые основные задачи математической теории упругости / Мухелишвили Н. И. – М.: Наука, 1966. – 708 с.
2. Прусов И. А. Метод сопряжения в теории плит / Прусов И. А. – Минск: Изд-во Белорус. ун-та, 1975. – 256 с.
3. Саврук М.П. Двумерные задачи упругости для тел с трещинами / Саврук М.П. – К.: Наук. Думка. – 1981. – 324 с.
4. Космодамианский А.С. Плоская задача теории упругости для пластин с отверстиями, вырезами, выступами / Космодамианский А.С. – К.: Выща школа, 1975. – 228 с.
5. Панасюк В. В. Распределение напряжений около трещин в пластинах и оболочках / Панасюк В. В., Саврук М. П., Дацышин А. П. – К.: Наук. думка, 1976. – 444 с.
6. Опанасович В. Двовісний згин безмежної пластини з абсолютно жорсткою шайбою та тріщиною, береги якої контактують / Опанасович В., Слободян М. // Вісник Львів. держ. аграр. ун-ту. – 2007. – № 8. – с. 75-87.
7. Опанасович В. К. Згин пластини з наскрізною прямолінійною тріщиною з урахуванням ширини області контакту її поверхонь / В.К. Опанасович // Наукові нотатки Луцького технічного університету. – 2007. – Вип. 20 (2). – С. 123–127.

На рис. 4 зображено графічні залежності критичного моменту $\tilde{M} = M_y^\infty \sqrt{\pi l / (2\gamma_* E)} / (2h^2)$ в залежності від $\tilde{x} = d/l$ при $a/b = 5$, $a/l = 1,5$. Криві 1-4 побудовані при відношенні згинальних моментів на нескінченності $\chi = M_x^\infty / M_y^\infty$ рівним 0,44; 0,7; 1,2 відповідно. Числовий аналіз показав, що при $\chi < 0,7$ $\tilde{M}$ спадає із збільшенням відносної відстані $\tilde{x}$, а при $\chi > 0,7$ $\tilde{M}$ зростає із збільшенням $\tilde{x}$. Крім того, коли $\tilde{x}$ прямує до безмежності, тобто коли тріщина знаходиться далеко від шайби, $\tilde{M}$ прямують до 1,326 (випадок однієї ізольованої тріщини).

На основі числового аналізу встановлено, що при віддаленні тріщини від жорсткого включення, контактне зусилля, зведені КІМ та критичний момент виходить на сталі значення для однієї тріщини [7].

References

1. MUSHELISHVILI, N.I. (1966) *Nekotorie osnovnie zadachi matematicheskoy teorii uprugosti*. Moscow: Nauka.
2. PRUSOV, I.A. (1975) *Metod sopragenia v teorii plit*. Minsk: Izdatelstvo Beloruskogo universiteta.
3. SAVRUK, M.P. (1981) *Dvumerniye zadachi uprugosti dlya tel s treshchinami*. Kyiv: Naukova Dumka.
4. KOSMODAMIANSKIY, A.S. (1975) *Ploskaya zadacha teorii uprugosti dlya plastin s otverstiyami, virezami, vystupami*. Kyiv: Vishcha shkola.
5. PANASUK, V.V., SAVRUK, M.P., DATSISHIN, A.P. (1976) *Raspredeleniye napragniy okolo treshchin v plastinakh i obolochkah*. Kyiv: Naukova Dumka.
6. OPANASOVYCH, V.K., SLOBODYAN, M.S. (2007) Dvovishiy zgin bezmegnoyi plastini z absolutno gorstkoyu shayboyu i trishchinju, beregi yakoyi kontaktuyut. *Visnyk Lvivskogo dergavnogo agrarnogo universitetu*. Vol. 8, pp. 75-87.
7. OPANASOVYCH, V.K. (2007) Zgin plastini z naskriznoyu trishchinoyu z urahuvanniam shirini oblasti kontaktu yiyi poverhon. *Naukovi notatki Luts'kogo tehniknogo universitetu*. № 20 (2). pp. 123–127.

Надійшла до редколегії 29.09.2015

УДК 519.9

Паткін Є. Д.¹, асистент

**Опис мартингальних мір для однієї
еволюції ризикових активів**

¹ Білоцерківський національний аграрний
університет, пл. Соборна, 8/1, м. Біла Церква,
Київська обл., Україна, 09117, e-mail:
patkin88@mail.ru

I. D. Patkin¹, assistant

**Description martingale measures for a single
evolution of risky assets**

¹Bila Tserkva state agrarian
University, 09117, Soborna sq. 8/1, Kiev reg.,
Ukraine e-mail: patkin88@mail.ru

На сучасному етапі розвитку світової економіки та глобалізації фондового ринку актуальним стає питання інвестування в цінні папери та побудови моделі прогнозу їх вартості.

Більшість робіт з даної тематики відносяться до моделювання поведінки активів на повних ринках, тобто ринках, на яких для еволюції кожного цінного паперу існує своя єдина мартингальна міра. Однак, як показують дослідження всі ринки є неповними, тобто не існує єдиної мартингальної міри для жодного ризикового активу. У зв'язку з цим постає задача опису усіх мартингальних мір для оцінювання вартості зобов'язання та побудови стратегії захисту інвестиції у цей цінний папір (хеджової стратегії). Саме до такого типу задач і відноситься задача, яка розв'язана в даній статті.

В роботі дано необхідні та достатні умови того, чи є міра мартингальною для еволюції даного активу.

Дана задача вперше була поставлена в роботі [1], де було доведено відсутність арбітражу. В роботі [2], використовуючи стохастичне числення, встановлено це твердження для мартингальних мір, у яких похідна Радона-Нікодіма обмежена згори.

Ключові слова: мартингальна міра, мартингал, ризиковий актив.

At the current stage of globalization of the world economy and the stock market urgent issue of investing in securities and constructing the model prediction of their value.

Most work on the subject related to behavior modeling assets on complete markets, ie markets where evolution for each security has its own unique martingale measure. However, research shows all markets are incomplete, that there is no single martingale measures for any risky asset. In this regard, there is the problem of describing all martingale measures for assessing the value of commitment and build strategies to protect investments in this security (hedge strategy). It is to this type of tasks and related problem that is solved in this article.

In this paper the necessary and sufficient conditions whether martingale measure for the evolution of the asset.

This problem was first staged in [1], which was proved by the absence of arbitrage. In [2], using stochastic calculus, found this statement to martingale measures, which Nikodyma derivative Radon-limited top.

Key words: martingale measure, martingale, risk asset.

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

На ймовірнісному просторі $\{\Omega, \mathfrak{F}, P_0\}$ розглядаємо еволюцію ризикового активу, заданого законом

$$S_n = (1 + \rho_n) S_{n-1}, \quad n = \overline{1, N}, \quad (1)$$

де $\rho_n, n = \overline{1, N}$ набуває значень з інтервалу $(-1, c], 0 < c < \infty$ і є послідовністю незалежних однаково розподілених випадкових величин, а неризиковий актив еволюціонує за законом $C_n \equiv 1, n = \overline{1, N}$. Тут

$$\Omega = \prod_{i=1}^N D_i, \quad D_i = (-1, c],$$

$$\omega = \{x_1, \dots, x_N\} \in \Omega,$$

$$\mathfrak{F} = \prod_{i=1}^n B(D_i), \quad P_0 = \prod_{i=1}^n P_i,$$

$\mathfrak{F}$ - мінімальна σ -алгебра, породжена множинами

$$C_{i_1, \dots, i_k}^{A_k} = \{\omega = \{x_i, \dots, x_N\}\},$$

$$(x_{i_1}, \dots, x_{i_k}) \in A_k,$$

$$A_k \in B\left(\prod_{i=1}^k D_i\right), \quad i_1, \dots, i_k \leq n.$$

$$P_i(A) = \int_A dF_i(x_i), \quad F_i(x_i) = P(\rho_i \leq x),$$

$$i = \overline{1, N},$$

$$A \in B(D_i).$$

Де $B(D_i)$ - борелева сигма-алгебра, побудована на множині D_i .

Припускаємо, що

$$\int_{-1}^{\infty} |x_n| dF_n(x_n) < \infty, \quad n = \overline{1, N}.$$

Нехай M - сукупність усіх мір, стосовно яких S_n є мартингал. Введемо на ній метрику

$$\rho(Q^k, Q) = \sup_{A \in \mathfrak{F}} |Q^k(A) - Q(A)|. \quad (2)$$

В роботі [3] показано щільність в множині мартингальних мір спеціального класу мартингальних мір і доведено наступне твердження:

Твердження. Нехай

$$\int_{-1}^0 x dF_n(x) < 0, \quad \int_0^c x dF_n(x) > 0. \quad \text{Тоді множина}$$

мартингальних мір Q таких, що

$$0 < l < \frac{dQ}{dP^0} < L < \infty \quad (3)$$

є щільною в загальній варіаційній топології [1] в множині розглядуваних в роботі [3] мартингальних мір.

Опишемо всю сукупність мартингальних мір, стосовно якої S_n є мартингал.

Нехай G - множина векторів виду

$$g = \{g_n(x_1, \dots, x_n)\}_{n=1}^N, \quad \text{де } g_n(x_1, \dots, x_n) \in \mathfrak{F}_n -$$

є вимірними і задовольняють наступні умови:

1. $g_n(x_1, \dots, x_n) \geq 0$;
2. $P_0(g_n(x_1, \dots, x_n) = 0) = 0$;
3. $\int_{-1}^c g_n(x_1, \dots, x_n) dF_n(x_n) = 1$;
4. $\int_{-1}^c g_n(x_1, \dots, x_n) x_n dF_n(x_n) = 0$;

Якщо

$$g_1, g_2 \in G, \quad a, 0 < a < 1, \quad \text{то } a g_1 + (1-a) g_2 \in G,$$

тобто G - опукла множина.

Кожному вектору g поставимо у відповідність міру P , еквівалентну до P_0 :

$$P(A) = \int \prod_{i=1}^N g_i(x_1, \dots, x_i) dP_0, \quad A \in \mathfrak{F} \quad (5)$$

Теорема. Для того, щоб міра P виду (5) була мартингальною мірою для еволюції ризикового активу (1), необхідно і достатньо, щоб існував вектор $g \in G$ такий, що має місце (5).

Доведення: Необхідність.

Нехай існує вектор $g \in G$ такий, що для еквівалентної міри P має місце подання (5). Доведемо, що P - мартингальна міра.

$$\text{Обчислимо } E^P \{S_n | \mathfrak{F}_{n-1}\}:$$

Нехай $A \in \mathfrak{F}_{n-1}$, де $A = B \times \prod_{i=n}^N D_i$, $B \in \prod_{i=1}^{n-1} B(D_i)$,

тоді

$$\begin{aligned} \int_A S_n dP &= \\ \int_A S_n \prod_{i=1}^N g_i(x_1, \dots, x_i) dP_0 &= \\ = \int_A (1+x_n) S_{n-1} \prod_{i=1}^N g_i(x_1, \dots, x_i) dP_0 &= \\ = \int_A (1+x_n) S_{n-1} \prod_{i=1}^N g_i(x_1, \dots, x_i) dF_1(x_1) dF_N(x_N) &= \\ = \int_{B \times \underbrace{[-1, c) \times \dots \times [-1, c)}_{N-n+1}} S_{n-1} (1+x_n) \prod_{i=1}^{n-1} g_i(x_1, \dots, x_i) \times \\ \times \prod_{i=n}^N g_i(x_1, \dots, x_i) dF_1(x_1) \dots dF_N(x_N) &= \\ = \int_B S_{n-1} \prod_{i=1}^{n-1} g_i(x_1, \dots, x_i) dF_1(x_1) \dots dF_{n-1}(x_{n-1}) \times \\ \times \int_{[-1, c)} (1+x_n) g_n(x_1, \dots, x_n) dF_n(x_n) \times \dots \times \\ \times \int_{[-1, c)} g_{n+1}(x_1, \dots, x_{n+1}) dF_{n+1}(x_{n+1}) \times \dots \times \\ \times \int_{[-1, c)} g_N(x_1, \dots, x_N) dF_N(x_N) &= \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} &= \int_B S_{n-1} \prod_{i=1}^{n-1} g_i(x_1, \dots, x_i) dF_1(x_1) \dots dF_{n-1}(x_{n-1}) \times \\ &\times \int_{[-1, c)} (1+x_n) g_n(x_1, \dots, x_n) dF_n(x_n) = \quad (7) \\ &= \int_B S_{n-1} \prod_{i=1}^{n-1} g_i(x_1, \dots, x_i) dF_1(x_1) \dots dF_{n-1}(x_{n-1}) = \\ &= \int_{B \times \underbrace{[-1, c) \times \dots \times [-1, c)}_{N-n+1}} S_{n-1} \times \\ &\times \prod_{i=1}^N g_i(x_1, \dots, x_i) dF_1(x_1) \dots dF_N(x_N) = \\ &= E^P S_{n-1} \chi_A(\omega). \quad (8) \end{aligned}$$

В рівностях в рядках (6)-(8) використано умову (3).

Внаслідок довільності $A \in \mathfrak{F}_{n-1}$ випливає потрібна рівність: $E^P \{S_n | \mathfrak{F}_{n-1}\} = S_{n-1}$.

Достатність. Нехай

$P(A) = \int_A f(x_1, \dots, x_N) \prod_{i=1}^N dF_i(x_i)$ є мартингальною мірою. Тоді $E^P \{S_n | \mathfrak{F}_{n-1}\} \equiv S_{n-1}$. З останнього випливає, що $E^{P_0} \{(1+x_n) f(x_1, \dots, x_N) | \mathfrak{F}_{n-1}\} = 1$.

Доведемо існування вектору $g \in G$, який задовольняє наведеним у лемі умовам. Нехай

$A \in \mathfrak{F}_{n-1}$, $A = B \times \underbrace{[-1, c) \times \dots \times [-1, c)}_{N-n+1}$, $B \in \prod_{i=1}^{n-1} B(D_i)$.

Покладемо $g = \{g_i(x_1, \dots, x_i)\}_{i=1}^N$, де

$$\begin{aligned} g_i(x_1, \dots, x_i) &= \\ &= \frac{\int_{\prod_{s=i+1}^N D_s} f(x_1, \dots, x_N) dF_{i+1}(x_{i+1}) \dots dF_N(x_N)}{\int_{\prod_{s=i}^N D_s} f(x_1, \dots, x_N) dF_i(x_i) \dots dF_N(x_N)}, \quad i = \overline{1, N}. \end{aligned}$$

Очевидно, що

$$\prod_{i=1}^N g_i(x_1, \dots, x_i) = f(x_1, \dots, x_N).$$

Доведемо, що $\int_{-1}^c g_n(x_1, \dots, x_n) x_n dF_n(x_n) = 0$.

Дійсно:

$$\begin{aligned} \int_A (1+x_n) f(x_1, \dots, x_N) dF(x_1) \dots dF_N(x_N) &= \\ &= \int_A (1+x_n) \prod_{i=1}^N g_i(x_1, \dots, x_N) dF_1(x_1) \dots dF_N(x_N) = \\ &= \int_B 1 \times \int_{(-1, c]} g_n(1+x_n) dF_n(x_n) \times \\ &\times \int_{(-1, c]} g_{n+1} dF_{n+1}(x_{n+1}) \times \dots \times \\ &\times \int_{(-1, c]} g_N dF_N(x_N) = \\ &= \int_B 1 \times \int_{(-1, c]} g_n(1+x_n) dF_n(x_n) = \\ &= \int_B 1 \times (1 + \int_{(-1, c]} g_n x_n dF_n(x_n)) = F_n(A). \end{aligned}$$

Або

$$\int_A 1 \times (1 + \int_{(-1, c]} g_n x_n dF_n(x_n)) = F_n(A).$$

Звідси:

$$\begin{aligned} F_n(A) + \int_A \left(\int_{(-1, c]} g_n x_n dF_n(x_n) \right) dF_1(x_1) dF_{n-1}(x_{n-1}) &= \\ = F_n(A), \quad \forall A \in \mathfrak{F}_{n-1}. \end{aligned}$$

Список використаних джерел

1. Dalang R. C. Equivalent martingale measures and no-arbitrage in stochastic securities market models/ Dalang R. C., Morton A., Willinger W. // Stochastic and stochastic reports, 29 (1990), p. 185-201.
2. Yu. Kabanov. On equivalent martingale measures with bounded densities/Yu. Kabanov and C. Striker.// UMR 6623, Laboratoire de Mathematiques, Universite de Franche-Comte 16 Route de Gray, F-25030 Besancon Cedex, FRANCE.
3. Паткін Є. Д., Приклад побудови мартингальних мір. /Паткін Є. Д.// Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка, серія фізико-математичні науки, 2013, 4, с. 59-62.

Вище використана наступна тотожність:

$$\int_B dF_n(x_n) = \int_A dF_n(x_n) \dots dF_N(x_N).$$

Після зменшення обох частин рівності на $F_n(A)$ отримуємо:

$$\int_A \left(\int_{(-1, c]} g_n(x_1, \dots, x_n) x_n dF_n(x_n) \right) dF_1(x_1) \dots dF_{n-1}(x_{n-1}) = 0,$$

або в наслідок довільності A :

$$\int_B \left(\int_{(-1, c]} g_n x_n dF_n(x_n) \right) dF_1(x_1) \dots dF_{n-1}(x_{n-1}) = 0,$$

$$\forall B \in \mathcal{B} \left(\prod_{i=1}^{n-1} D_i \right).$$

З останнього співвідношення випливає, що

$$\int_{-1}^c g_n(x_1, \dots, x_n) x_n dF_n(x_n) = 0.$$

Лему доведено.

References

1. DALANG, R., MORTON, A. & WILLINGER W. (1990) Equivalent martingale measures and no-arbitrage in stochastic securities market models. *Stochastic and stochastic reports*. 29. p. 185-201.
2. KABANOV, Y. & STRIKER, C. (2001) On equivalent martingale measures with bounded densities. *UMR 6623, Laboratoire de Mathematiques, Universite de Franche-Comte 16 Route de Gray, F-25030 Besancon Cedex, FRANCE*.
3. PATKIN I. D. (2013) Pryklad pobudovu martinhalnikh mir. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series Physics & Mathematics*, 4, P. 59-62.

Надійшла до редколегії 28.09.2015

УДК 517.9

Репета Б. В.¹, аспірант.

Аналог біфуркації Андронова–Гопфа у системі з кривою положень рівноваги

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4е,
e-mail: bogdan.repeta@gmail.com

B. V. Repeta¹, graduate student.

A counterpart of the Andronov–Hopf bifurcation in a system with a curve of equilibria

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4e,
e-mail: bogdan.repeta@gmail.com

У статті розглянуто динамічний аналог біфуркації Андронова–Гопфа у системі з швидкими та повільними змінними, в якій різниця часових масштабів їх еволюції зумовлена характером нелінійності правих частин в околі одновимірного многовиду положень рівноваги. Показано, що в одночастотній системі під час втрати властивості стійкості цим многовидом внаслідок повільної еволюції параметра відбувається перехід від затухаючих коливань до періодичного коливального режиму.

Ключові слова: динамічні біфуркації, біфуркація Гопфа, перехідні процеси.

In this paper we consider a dynamical counterpart of the Andronov–Hopf bifurcation in a system with fast and slow variables in which the time scale difference of their evolution is due to the non-linear nature of the right-hand sides. By means of the normal forms method, we show that while the trivial invariant manifold loses its stability property as the parameter slowly evolves there occurs a transition from damping oscillations to a periodic oscillatory regime in a mono-frequency system. Such a transition is not as straightforward as in case of a singularly perturbed system. In particular, here the trivial invariant manifold is a curve of equilibria. Moreover, the phase space can be split into two regions with the following properties. The forward trajectories which start from the first region approach the trivial invariant manifold, i. e. the oscillations amplitude decays, whereas the forward trajectories starting from the second region approach an asymptotically stable cycle. Thus, the aforementioned transition is only observable if the initial point of a trajectory does not lie too close to the curve of equilibria before the stability change takes place.

Key Words: dynamical bifurcations, Hopf bifurcation, transitional processes.

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

Вступ

Під час моделювання фізичних явищ часто виникає ситуація, коли спостережувані змінні еволюціонують у різних часових масштабах і доводиться мати справу із системами зі швидкими та повільними змінними. Як правило такі системи записують у вигляді

$$\dot{x} = f(x, u, \varepsilon), \quad \dot{u} = \varepsilon g(x, u, \varepsilon),$$

де ε є малим статичним параметром, а x та u — швидкими та повільними змінними відповідно. Значний інтерес при цьому становить вивчення ефектів, пов'язаних із поведінкою розв'язків поблизу повільного многовиду $f(x, u, 0) = 0$, а саме різких стрибків за межі його околу, виникнення релаксаційних коливань, тощо.

Всебічний розвиток власне динамічних біфуркацій, зумовлених проходженням повільними змінними своїх критичних значень, розпочався із появою робіт [1–3]. Серед найбільш вагомих здобутків у даному напрямі варто відзначити результати, що стосуються явища втрати стійкості з запізненням [2, 4] та теорії розв'язків-«качок» сингулярно збурених систем [5–7]. Зокрема у [6] також наведено опис динамічної біфуркації Гопфа двовимірної системи з повільним часом.

Ми в свою чергу пропонуємо у цій статті розглянути випадок, коли різниця масштабів часу еволюції змінних спричинена не наявністю малого множника у відповідній підсистемі, а характером нелінійності правих частин. Так у системі

$$\dot{x} = f(x, u, \varepsilon), \quad \dot{u} = g(x, u, \varepsilon) \quad (1)$$

із функціями $f(x, u, \varepsilon) = O(\|x\|)$ та $g(x, u, \varepsilon) = o(\|x\|)$ при $x \rightarrow 0$ в околі тривіального інваріантного многовиду $x = 0$ різниця часових масштабів еволюції змінних виникає за рахунок відмінності порядків мализни відповідних функцій. А отже, для такої системи постає питання про аналогію між її динамікою та поведінкою розв'язків сингулярно збурених систем. У першу чергу нас цікавить динамічна біфуркація, що відбувається під час втрати тривіальним інваріантним многовидом властивості стійкості, коли повільно змінний параметр проходить певне критичного значення.

Поверховий опис підходів для систематичного вивчення біфуркацій такого типу та їх локальний аналіз можна знайти у [8], де цей феномен відомий під назвою біфуркації без параметрів. А у статті [9] також окреслено зв'язок між класичною та динамічною біфуркаціями Гопфа. Окрім цього вона дає інформацію про поведінку розв'язків на часових інтервалах величини $O(\varepsilon^{-1})$ та про їх асимптотичне запізнення. Однак тверджень стосовно існування граничного циклу автори не наводять.

Ми в свою чергу ставимо собі за мету надати, наскільки це можливо, повний опис динамічної біфуркації Андронова–Гопфа у системі (1). Спираючись на результати [10], зокрема щодо побудови нормальних форм, ми розглянемо випадок існування періодичного розв'язку одночастотної системи зі скалярним повільно змінним параметром та покажемо, що за певних природних умов, цей цикл притягує усі інші розв'язки в малому околі многовиду $x = 0$.

Основні припущення

Будемо розглядати диференціальну систему (1) у якій $x \in \mathbb{R}^2$, $u \in \mathbb{R}$, і $\varepsilon \in \mathbb{R}$ є малим статичним параметром, за таких припущень.

H1. Праві частини системи (1) $f, g \in C^\infty(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R})$ мають обмежені похідні усіх порядків.

H2. Система має інваріантний многовид, заданий рівнянням $x = 0$, і при цьому $f(0, u, \varepsilon) = 0$, $g(0, u, \varepsilon) = 0$, $g'_x(0, u, \varepsilon) = 0$ для всіх $(u, \varepsilon) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$.

H3. При всіх u із деякого інтервалу $I \subset \mathbb{R}$ оператор $f'_x(0, u, 0)$ має суто уявні власні числа $\pm i\omega(u)$, причому $\inf\{\omega(u) : u \in I\} > 0$.

Відзначимо, що забезпечити додаткову умову $g'_x(0, u, \varepsilon) = 0$ можна виконанням заміни $u \mapsto u + g'_x(0, u, \varepsilon)[f'_x(0, u, \varepsilon)]^{-1}$. Тоді за припущенням H2 праві частини системи (1) мають різні

порядки мализни щодо x . Тобто поблизу інваріантного многовиду, заданого рівнянням $x = 0$, що повністю складається із положень рівноваги, змінну u природно вважати повільними у порівнянні зі змінними x . Останні відіграватимуть роль основних спостережуваних змінних, у той час як u будемо інтерпретувати як параметр, що повільно еволюціонує.

Щоб дослідити систему (1), зведемо її до більш зручного вигляду, застосувавши метод нормальних форм, описаний у [10]. Будемо вважати, що параметр ε додатний. Тоді після здійснення відповідної процедури та переходу до змінних полярного типу, врешті-решт будемо мати систему виду

$$\begin{aligned} \dot{r} &= 2\varepsilon[\alpha(v, \varepsilon) - A(v, \varepsilon)r]r + \varepsilon^2 R(r, v, \varphi, \varepsilon)r^2, \\ \dot{v} &= \varepsilon c(v, \varepsilon)r + \varepsilon^2 C(r, v, \varphi, \varepsilon)r^2, \\ \dot{\varphi} &= \omega(v, \varepsilon) + \varepsilon b(v, \varepsilon)r + \varepsilon^2 \Phi(r, v, \varphi, \varepsilon)r^2 \end{aligned} \quad (2)$$

з гладкими обмеженими функціями α, A, c, ω та b на множині $V \times [0, \varepsilon_0]$, а також гладкими функціями R, C і Φ на множині $[0, c] \times V \times S \times [0, \varepsilon_0]$ для деякого $c > 0$, такого що $c \leq 1$, коли $\varepsilon_0 \leq 1$, та відрізка $V \subset I$. При цьому ми будемо природним чином ототожнювати будь-які дві точки $(0, v, \varphi_1)$ та $(0, v, \varphi_2)$ і розглядати задану у такий спосіб множину I , визначену рівнянням $r = 0$, що є представленням многовиду $x = 0$ у полярних координатах.

Уведемо також позначення $\alpha(v) = \alpha(v, 0)$, $A(v) = A(v, 0)$, $c(v) = c(v, 0)$ та зробимо додаткові припущення стосовно коефіцієнтів системи (2).

H4. Відрізок V містить внутрішні точки $v_* < v^*$ такі, що мають місце співвідношення

$$\begin{aligned} c(v) &> 0 \quad \forall v \in V \cap \{v < v^*\}, \quad c(v^*) = 0, \quad c'(v^*) < 0, \\ \{v \in V : \alpha(v) = 0\} &= \{v_*\}, \quad \alpha'(v_*) > 0, \\ \inf_{v \in V} A(v) &> 0. \end{aligned}$$

За цих умов з теореми про неявну функцію випливає таке твердження.

Твердження 1. При всіх достатньо малих значеннях $\varepsilon > 0$ існують гладкі функції $v_*(\varepsilon)$ і $v^*(\varepsilon)$ такі, що $\text{sgn} \alpha(v, \varepsilon) = \text{sgn}(v - v_*(\varepsilon))$ для всіх $v \in V$ та $c(v^*(\varepsilon), \varepsilon) = 0$.

Визначимо тепер значення $\sigma > 0$ так, щоб $v^* + \sigma < \max V$ і для деякого $\delta > 0$ при всіх $v \in [v^* - \sigma, v^* + \sigma] \subset V$ справджувалась оцінка $c'(v) < -\delta$. Також виберемо додатні числа ε_0 настільки великим та малим відповідно, щоб

$$\begin{aligned} 2[\alpha(v, \varepsilon) - A(v, \varepsilon)c] + \varepsilon c \bar{R} &< 0 \\ \forall (v, \varepsilon) &\in V \times [0, \varepsilon_0], \\ c(\min V, \varepsilon) - \varepsilon \bar{\zeta} &> 0, \quad c(v^* + \sigma, \varepsilon) + \varepsilon \bar{\zeta} < 0 \\ \forall \varepsilon &\in [0, \varepsilon_0], \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} \bar{R} &= \{R(r, v, \varphi, \varepsilon) : (r, v, \varphi, \varepsilon) \in [0, c] \times V \times S \times [0, \varepsilon_0]\}, \\ \bar{\zeta} &= \{rC(r, v, \varphi, \varepsilon) : (r, v, \varphi, \varepsilon) \in [0, c] \times V \times S \times [0, \varepsilon_0]\}. \end{aligned}$$

У такому разі можна розглядати траєкторії системи (2), що лежать у додатно напівінваріантній множині $R_{\sigma, \varepsilon} \times S$, де $R_{\sigma, \varepsilon} = (0, c) \times (V \cap \{v < v^* + \sigma\})$, яка має таку структуру.

Твердження 2. Множина $R_{\sigma, \varepsilon} \times S$ розкладається на дві непорожні підмножини D_{ε}^{-} та D_{ε}^{+} з такими властивостями:

- 1) додатна півтраєкторія, що стартує з D_{ε}^{-} , прямує при $t \rightarrow \infty$ до нерухомої точки, що належить I та має координату $v \leq v_*(\varepsilon)$;
- 2) додатна півтраєкторія, що стартує з D_{ε}^{+} , не має ω -граничних точок на I , причому, якщо $v_0 < v_*(\varepsilon)$, то така траєкторія в певний момент часу перетне площину $v = v_*(\varepsilon)$.

Доведення. Виключивши у системі (2) час, вважаючи v незалежною змінною, будемо мати рівняння

$$\frac{dr}{dv} = \left[-\frac{2A(v, \varepsilon)}{c(v, \varepsilon)} + \varepsilon P(r, v, \varphi, \varepsilon) \right] r + \frac{2\alpha(v, \varepsilon)}{c(v, \varepsilon)},$$

де $P(r, v, \varphi, \varepsilon)$ визначається як

$$\frac{c(v, \varepsilon)R(r, v, \varphi, \varepsilon) - 2[\alpha(v, \varepsilon) - A(v, \varepsilon)r]C(r, v, \varphi, \varepsilon)}{c(v, \varepsilon)[c(v, \varepsilon) + \varepsilon C(r, v, \varphi, \varepsilon)r]}.$$

Позначивши

$$m(v, \varepsilon) = \min_{(r, \varphi) \in [0, c] \times S} P(r, v, \varphi, \varepsilon),$$

та розв'язавши диференціальну нерівність

$$\frac{dr}{dv} \geq \left[-\frac{2A(v, \varepsilon)}{c(v, \varepsilon)} + \varepsilon m(v, \varepsilon) \right] r + \frac{2\alpha(v, \varepsilon)}{c(v, \varepsilon)}$$

прийдемо до висновку, що множина тих $(r_0, v_0, \varphi_0) \in R_{\sigma, \varepsilon} \times S$, для яких $v < v_*(\varepsilon)$ та

$$r_0 \geq - \int_{v_0}^{v_*(\varepsilon)} \frac{2\alpha(v, \varepsilon)}{c(v, \varepsilon)} \exp \int_s^{v_*(\varepsilon)} \left(\varepsilon m(v, \varepsilon) - \frac{2A(\tau, \varepsilon)}{c(\tau, \varepsilon)} \right) d\tau ds$$

є непорожньою підмножиною множини D_{ε}^{+} . Непорожність D_{ε}^{-} доводиться аналогічно. $\square$

Існування асимптотично стійкого циклу

Нехай $(r_0, v_0, \varphi_0) \in D_{\varepsilon}^{+}$ є початковою точкою розв'язку (r_t, v_t, φ_t) системи (2). За побудовою множини D_{ε}^{+} настане такий момент $t_* > 0$, що $v_{t_*} = v_*(\varepsilon)$. При цьому яким би малим не було $\delta \in (0, c)$, існує підобласть $D_{\varepsilon, \delta}^{+} \subset D_{\varepsilon}^{+}$ така, що для $(r_0, v_0, \varphi_0) \in D_{\varepsilon, \delta}^{+}$ будемо мати $r_{t_*} \in (0, \delta)$. Множина $D_{\varepsilon, \delta}^{+}$ є непорожньою, що випливає із тих самих міркувань, що й у доведенні твердження 2, та має таку властивість.

Твердження 3. Якщо $\varepsilon > 0$ є достатньо малим та $(r_0, v_0, \varphi_0) \in D_{\varepsilon, \delta}^{+}$, то радіальна компонента розв'язку r_t спадає з експоненціальною швидкістю на проміжку $t \in (0, \tau)$ для довільного $\tau < t_*$.

Доведення. Зменшимо в разі потреби значення $\varepsilon_0 > 0$ настільки, щоб для всіх $\varepsilon \in [0, \varepsilon_0]$ і $v \in [v_0, v_*(\varepsilon)]$ справджувались співвідношення

$$\varepsilon \bar{R} - 2A(v, \varepsilon) < 0,$$

$$\vartheta(v, \varepsilon) := c(v, \varepsilon) + \varepsilon \bar{\zeta} > 0.$$

Тоді на проміжку $t \in (0, \tau)$ компоненти r_t та v_t розв'язку системи (2) задовольняють пару диференціальних нерівностей

$$\dot{r} \leq 2\varepsilon \alpha(v, \varepsilon)r, \quad \dot{v} \geq \varepsilon \vartheta(v, \varepsilon)r.$$

Права частина другої нерівності є додатною, тобто v_t зростає від початкового значення v_0 до $v_{\tau} < v_*(\varepsilon)$. А отже, має місце оцінка $r_t \leq r_0 \exp(2\bar{\alpha}(\varepsilon)\tau)$, де число $\bar{\alpha}(\varepsilon) = \max\{\alpha(v, \varepsilon) : v \in [v_0, v_{\tau}]\}$ є від'ємним за припущенням Н4. $\square$

Далі, з нерівності $c'(v^*) < 0$ випливає існування та єдиність для всіх достатньо малих $\varepsilon > 0$ розв'язків $v_{-}^*(\varepsilon)$ і $v_{+}^*(\varepsilon)$ рівнянь $c(v, \varepsilon) = \varepsilon(\bar{\zeta} + 1)$ та $c(v, \varepsilon) = -\varepsilon(\bar{\zeta} + 1)$ відповідно. При цьому $v_{-}^*(\varepsilon) < v^*(\varepsilon) < v_{+}^*(\varepsilon)$ і $|v_{\pm}^*(\varepsilon) - v^*(\varepsilon)| = O(\varepsilon)$, коли $\varepsilon \rightarrow 0+$. Це дає змогу охарактеризувати поведінку розв'язку після моменту t_* .

Твердження 4. Нехай числа $\varepsilon > 0$ та $\varsigma > 0$ достатньо малі. Тоді множина

$$G_{\varepsilon} = \{(r, v, \varphi) : r \in (0, c), v \in (v_{-}^*(\varepsilon), v_{+}^*(\varepsilon)), \varphi \in S\}$$

є додатно напівінваріантною. Причому для точки $(r_0, v_0, \varphi_0) \in D_{\varepsilon}^{+}$ знайдеться момент $t^* > t_*$ такий, що при всіх $t > t^*$ розв'язок (r_t, v_t, φ_t) належить до множини G_{ε} та справджується нерівність $r_t \geq \rho_{\varepsilon, \varsigma}$, у якій $\rho_{\varepsilon, \varsigma} = \min\{r_{t^*}^*, \varsigma\}$.

Доведення. З оцінок

$$0 < \mathcal{G}(v, \varepsilon) \leq c(v, \varepsilon) + \varepsilon C(r, v, \varphi, \varepsilon) r \quad \forall v \in [v_0, v_+^*(\varepsilon)],$$

$$c(v_+^*(\varepsilon), \varepsilon) + \varepsilon C(r, v_+^*(\varepsilon), \varphi, \varepsilon) r \leq$$

$$\leq c(v_+^*(\varepsilon), \varepsilon) + \varepsilon \bar{\zeta} = -\varepsilon < 0$$

впливає додатна напівінваріантність області G_ε та існування вказаного моменту t^* . А якщо вважати числа $\varepsilon_0 > 0$ і $\zeta > 0$ настільки малими, що

$$2[\alpha(v, \varepsilon) - A(v, \varepsilon)\zeta] - \varepsilon \bar{\zeta} \bar{R} > \varepsilon$$

$$\forall (v, \varepsilon) \in [v_-(\varepsilon), v_+^*(\varepsilon)] \times [0, \varepsilon_0],$$

то дістанемо нерівність

$$\dot{r}_t \geq \varepsilon^2 r_t \quad \forall t \in \{t \geq t^* : r_t \in (0, \zeta)\},$$

звідки $r_t \geq \min\{r_*, \zeta\}$. □

Оскільки за малих $\varepsilon > 0$ похідна компоненти φ_t є додатною, ми можемо перейти до незалежної змінної φ , виключивши час у системі (2), після чого отримаємо систему

$$\frac{dr}{d\varphi} = \varepsilon r [\beta(v) - B(v)r + \varepsilon p(r, v, \varphi, \varepsilon)],$$

$$\frac{dv}{d\varphi} = \varepsilon r [\gamma(v) + \varepsilon q(r, v, \varphi, \varepsilon)],$$

у якій

$$\beta(v) = \frac{2\alpha(v)}{\omega(v)}, \quad B(v) = \frac{2A(v)}{\omega(v)}, \quad \gamma(v) = \frac{c(v)}{\omega(v)},$$

а функції $p(r, v, \varphi, \varepsilon)$ та $q(r, v, \varphi, \varepsilon)$ визначаються як

$$\frac{\hat{R}(r, v, \varphi, \varepsilon)\omega(v)r - 2[\alpha(v) - A(v)r]\hat{\Phi}(r, v, \varphi, \varepsilon)}{\omega(v)[\omega(v) + \varepsilon\hat{\Phi}(r, v, \varphi, \varepsilon)]}$$

та

$$\frac{\hat{C}(r, v, \varphi, \varepsilon)\omega(v)r - c(v)\hat{\Phi}(r, v, \varphi, \varepsilon)}{\omega(v)[\omega(v) + \varepsilon\hat{\Phi}(r, v, \varphi, \varepsilon)]}$$

відповідно, де

$$\hat{R}(r, v, \varphi, \varepsilon) = 2\varepsilon^{-1}[\alpha(v, \varepsilon) - \alpha(v) - A(v, \varepsilon)r + A(v)r]r + R(r, v, \varphi, \varepsilon)r^2,$$

$$\hat{C}(r, v, \varphi, \varepsilon) = \varepsilon^{-1}[c(v, \varepsilon) - c(v)]r + C(r, v, \varphi, \varepsilon)r^2,$$

$$\hat{\Phi}(r, v, \varphi, \varepsilon) = \varepsilon^{-1}[\omega(v, \varepsilon) - \omega(v)]r + b(v, \varepsilon)r + \varepsilon\Phi(r, v, \varphi, \varepsilon)r^2.$$

Як наслідок із попередніх міркувань, якщо для розв'язку $(r(\varphi), v(\varphi))$ системи (3) мають місце рівності

$$\varphi_* = \varphi_t^*, \quad r(\varphi_*) = r_t^*, \quad v(\varphi_*) = v_t^*,$$

то для нього виконуватимуться співвідношення

$$\rho_{\varepsilon, \zeta} \leq r(\varphi) < c, \quad v_-(\varepsilon) < v(\varphi) < v_+^*(\varepsilon) \quad \forall \varphi > \varphi_*.$$

Будемо вважати, що ε_0 настільки мале, що при всіх $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$

$$[v_-(\varepsilon), v_+^*(\varepsilon)] \subset [v^* - \sigma, v^* + \sigma].$$

Позначимо $r^* = \alpha(v^*) / A(v^*)$ та

$$W(r, v) = \frac{(r - r^*)^2}{\eta^2} + \frac{(v - v^*)^2}{\sigma^2},$$

де η є настільки великим, що

$$\max \left\{ \frac{[r^*]^2}{\eta^2}, \frac{[c - r^*]^2}{\eta^2} \right\} < \frac{3}{4}.$$

(3) Тоді, вважаючи що $c > r^*$, еліпс $W(r, v) = 1$ лежатиме у смужці $v \in [v^* - \sigma, v^* + \sigma]$ та міститиме прямокутник $[0, c] \times [v^* - \sigma, v^* + \sigma]$.

Твердження 5. Знайдеться таке $L > 0$, що кожен розв'язок $(r(\varphi), v(\varphi))$ системи (3), який проходить через область G_ε , увійде до множини

$$E_\varepsilon = \{(r, v) : W(r, v) \leq \varepsilon L\}$$

та буде залишатися у ній. При цьому для всіх досить малих $\varepsilon > 0$ множина E_ε буде лежати всередині $(0, c) \times (v^* - \sigma, v^* + \sigma)$.

Доведення. Позначимо $w(\varphi) = W(r(\varphi), v(\varphi))$. Тоді беручи до уваги, що $\beta(v^*) - B(v^*)r^* = 0$ та $\gamma(v^*) = 0$, вздовж розв'язку $r = r(\varphi), v = v(\varphi)$ справджується нерівність

$$\frac{w'(\varphi)}{2\varepsilon} = \frac{r(r - r^*)}{\eta^2} [\beta(v) - \beta(v^*) - B(v)r + B(v^*)r^* + \varepsilon p(r, v, \varphi, \varepsilon)] +$$

$$+ \frac{r(v - v^*)}{\sigma^2} [\gamma(v) - \gamma(v^*) + \varepsilon q(r, v, \varphi, \varepsilon)] \leq$$

$$\leq r \left[-\frac{B(v^*)}{\eta^2} (r - r^*)^2 + \frac{M_{\beta, B}}{\eta^2} |r - r^*| |v - v^*| - \right.$$

$$\left. - \frac{\text{III}}{\sigma^2} (v - v^*)^2 + \varepsilon M_{p, q} \right]$$

із відповідним чином вибраними додатними сталими $M_{\beta,B}$ та $M_{p,q}$. Якщо за потреби збільшити значення η настільки, щоб виконувалась нерівність $\eta^2 > \sigma^2 M_{\beta,B}^2 / [4B(v^*)\psi]$, то знайдеться $\lambda > 0$ таке, що

$$w'(\varphi) \leq -2\varepsilon p_{\varepsilon,\zeta} [\lambda w(\varphi) - \varepsilon M_{p,q}] \quad \forall \varphi > \varphi_*.$$

А отже, існує таке $\varphi^* \geq \varphi_*$, що $w(\varphi) < \varepsilon L$ при всіх $\varphi > \varphi^*$, якщо покласти $L = 2\varepsilon M_{p,q} / \lambda$. $\square$

Твердження 6. Множина E_ε містить періодичний розв'язок $(\tilde{r}(\varphi), \tilde{v}(\varphi))$ системи (3), що притягує кожен інший розв'язок, який при деякому φ' потрапляє в E_ε .

Доведення. Позначимо $\xi = (r - r^*, v - v^*)$ та $S = \text{diag}\{\eta^{-2}, \sigma^{-2}\}$. Тоді $W(r, v) = \langle S\xi, \xi \rangle$, а система (3) набуде вигляду

$$\frac{d\xi}{d\varphi} = \varepsilon X(\xi) + \varepsilon^2 \bar{X}(\xi, \varphi, \varepsilon)$$

із

$$X(\xi) = \begin{pmatrix} [\beta(v) - B(v)r]r \\ \gamma(v)r \end{pmatrix},$$

$$\bar{X}(\xi, \varphi, \varepsilon) = \begin{pmatrix} p(r, v, \varphi, \varepsilon) \\ q(r, v, \varphi, \varepsilon) \end{pmatrix}.$$

Оскільки за умови достатньої мализни ε_0 при всіх $\varepsilon \in [0, \varepsilon_0]$ множина E_ε лежить вище прямої $r = r^*$, то, як впливає із попереднього твердження, для кожного $\xi \in \square^2$ має місце нерівність

$$2\langle Sz\xi, X(z\xi) \rangle \leq -\lambda r^* \langle Sz\xi, z\xi \rangle.$$

Звідси, спрямувавши $z \rightarrow 0$, отримаємо таке співвідношення

$$2\langle S\xi, X'(0)\xi \rangle \leq -\lambda r^* \langle S\xi, \xi \rangle.$$

Виберемо тепер довільну пару розв'язків $\xi_1(\varphi), \xi_2(\varphi)$ таких, що $\langle S\xi_i(\varphi'), \xi_i(\varphi') \rangle \leq \varepsilon L$, $i = 1, 2$, для деякого φ' . Зменшивши у разі потреби $\varepsilon_0 > 0$, можна досягти якої завгодно мализни при всіх $\varphi > \varphi'$ значення

$$\varepsilon \int_0^1 [X'(\xi) - X'(0) + \varepsilon \bar{X}'(\xi, \varphi, \varepsilon)]_{\xi=s\xi_1(\varphi)+(1-s)\xi_2(\varphi)} ds,$$

а отже, справедливості нерівностей

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\varphi} \langle S[\xi_1(\varphi) - \xi_2(\varphi)], \xi_1(\varphi) - \xi_2(\varphi) \rangle \leq \\ & \leq \langle S[\xi_1(\varphi) - \xi_2(\varphi)], \varepsilon X'(0)[\xi_1(\varphi) - \xi_2(\varphi)] \rangle \leq \\ & \leq -\frac{\varepsilon \lambda r^*}{2} \langle S[\xi_1(\varphi) - \xi_2(\varphi)], \xi_1(\varphi) - \xi_2(\varphi) \rangle \quad \forall \varphi > \varphi'. \end{aligned}$$

Таким чином маємо властивість конвергентності системи (3) всередині E_ε . $\square$

Підсумовуючи все вище сказане, сформулюємо тепер основний результат даної статті.

Теорема 1. Нехай виконуються умови Н4, значення $c > r^*$, а число $\varepsilon_0 > 0$ є достатньо малим. Тоді при всіх $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ система (2) має асимптотично стійкий цикл C_ε , розташований всередині множини $E_\varepsilon \times S$ і який притягує усі додатні півтраєкторії, що починаються в D_ε^+ . При цьому, яким би малим не було $\delta \in (0, c)$, існує підобласть $D_{\varepsilon,\delta}^+ \subset D_\varepsilon^+$, що розв'язок (r_t, v_t, φ_t) із початковими даними $(r_0, v_0, \varphi_0) \in D_{\varepsilon,\delta}^+$ поводить себе у такий спосіб. Спочатку впродовж деякого часу $t \in [0, t_*]$ компонента v_t зростає, в той час як r_t спадає з експоненціальною швидкістю, демонструючи затухачі коливання. Після цього відбувається перехід до усталеного коливального режиму, і починаючи з деякого моменту $t^* > t_*$ розв'язок потрапляє в множину $E_\varepsilon \times S$ та притягується циклом C_ε .

Висновки

Ми розглянули одночастотну динамічну систему зі швидкими та повільними змінними $x \in \square^2$ та $u \in \square$ відповідно, що демонструє перехідний процес схожий на явище біфуркації народження граничного цикла. На відміну від сингулярно збурених систем, різниця у часових масштабах в околі тривіального інваріантного многовиду $x=0$ була зумовлена характером нелінійності підсистеми для повільного параметра u : відповідні праві частини мали порядок $o(\|x\|)$ при $x \rightarrow 0$, в той час як лінійна частина підсистеми для швидких змінних x була невивіржена.

Ми показали, що вищезгадана система має у своєму фазовому просторі пару непорожніх множин D_ε^- та D_ε^+ з такими властивостями. Траєкторії з першої множини ілюструють затухаючі коливання, в той час як траєкторії з другої спочатку впродовж деякого часу наближаються до інваріантного многовиду $x=0$, після чого прямують до асимптотично стійкого граничного циклу. Многовид $x=0$ при цьому складається повністю із положень рівноваги.

Список використаних джерел

1. *Нейштадт А. И.* Асимптотическое исследование потери устойчивости равновесия при медленном прохождении пары собственных чисел через мнимую ось / А. И. Нейштадт // *Успехи мат. наук.* – 1985. – **40**, №5. – С. 300–301.
2. *Нейштадт А. И.* О затягивании потери устойчивости при динамических бифуркациях / А. И. Нейштадт // *Дифференц. уравн.* – 1987. – **23**, №12. – С. 2060–2067; 1988. – **24**, №2. – С. 226–233.
3. *Шишкова М. А.* Рассмотрение одной системы дифференциальных уравнений с малым параметром при высших производных / М. А. Шишкова // *Докл. АН СССР.* – 1973. – **209**, №3. – С. 576–579.
4. *Аносова О. Д.* Инвариантные многообразия и динамические бифуркации / О. Д. Аносова // *Успехи мат. наук.* – 2005. – **60**, №1. – С. 157–158.
5. *Картье П.* Сингулярные возмущения обыкновенных дифференциальных уравнений и нестандартный анализ / П. Картье // *Успехи мат. наук.* – 1984. – **39**, №2. – С. 57–76.
6. *Butuzov V. F.* Singularly perturbed problems in case of exchange of stabilities / V. F. Butuzov, N. N. Nefedov, K. R. Schneider // *J. Math. Sci.* – 2004. – **121**, №1. – P. 1973–2079.
7. *Dynamic bifurcations* / È. Benoît // *Lect. Notes Math.* – Berlin etc.: Springer-Verlag, 1991. – **1493**. – 219 p.
8. *Liebscher S.* Bifurcation without Parameters / S. Liebscher // *Lect. Notes Math.* – Springer International Publishing, 2015. – **2117**. – 142 p.
9. *Rachinskii D.* Dynamic Hopf bifurcations generated by nonlinear terms / D. Rachinskii, K. Schneider // *J. Different. Equat.* – 2005. – **210**, №1. – P. 65–86.
10. *Самойленко А. М.* Динамічна біфуркація багаточастотних коливань у швидкоповільній системі / А. М. Самойленко, І. О. Парасюк, Б. В. Репета // *Укр. мат. журн.* – 2015. – **67**, №7. – P. 890–915.

References

1. NEISHTADT, A. I. (1985) Asimptoticheskoe issledovanie poteri ustoichivosti ravno-vesiia pri medlennom prokhozhenii pary sobstvennykh chisel cherez mnimuiu os. *Uspekhi mat. nauk.* 40 (5). p. 300–301.
2. NEISHTADT, A. I. (1987) O zatiagivanii poteri ustoichivosti pri dinamicheskikh bifurcatsiyakh. *Differenz. uravn.* 23 (12). p. 2060–2067; (1988) 24 (2). p. 226–233.
3. SHISHKOVA, M. A. (1973) Rassmotreniie odnoi sistemy differentsialnykh uravnenii s malym parametrom pri vysshykh proizvodnykh. *Dokl. AN SSSR.* 209 (3). p. 576–579.
4. ANOSOVA, O. D. (2005) Invariantnye mnogoobrazia i dinamicheskie bifurkatsyi. *Uspekhi mat. nauk.* 60 (1). p. 157–158.
5. KARTIE, P. (1984) Singuliarnye vozmushcheniia obyknovennykh differentsialnykh uravnenii I nestandartnyi analiz. *Uspekhi mat. nauk.* 39 (2). p. 57–76.
6. BUTUZOV, V. F. & NEFEDOV, N. N. & SCHNEIDER, K. R. (2004) Singularly perturbed problems in case of exchange of stabilities. *J. Math. Sci.* 121 (1). p. 1973–2079.
7. BENOÎT, È. (ed.) (1991) *Dynamic bifurcations*. Berlin: Springer-Verlag.
8. LIEBSCHER, S. (2015) *Bifurcation without parameters*. Lect. Notes Math. Springer International Publishing.
9. RACHINSKII, D. & SCHNEIDER, K. (2005) Dynamic Hopf bifurcations generated by nonlinear terms. *J. Different. Equat.* 210 (1). p. 65–86.
10. SAMOILENKO, A. M. & PARASIUK, I. O. & REPETA, B. V. (2015) Dynamichna bifurkatsiia bahatochastotnykh kolyvan u shvydko-povilnii systemi. *Ukr. mat. zhurn.* 67 (7). p. 890–915.

Надійшла до редколегії 15.09.15

УДК 532.595

І. Ю. Семенова¹, к. ф.-м. н.

Semenova I. Yu.¹, PhD.

Нелінійні коливання рідини в параболічному резервуарі при наявності пружного закріплення.

Nonlinear liquid sloshing in a parabolic tank with elastic fixation.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4е, e-mail: irina.semenova25@gmail.com

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4e, e-mail: irina.semenova25@gmail.com

Розглянуто задачу про нелінійні коливання рідини в рухомому резервуарі параболічної форми при наявності пружного закріплення. Сумісні коливання такої механічної системи мають власні частоти, які значно відрізняються від парціальних частот коливань. Показано, що резонансні властивості системи суттєво проявляються на частотах, що пов'язані з домінуванням пружних коливань резервуару.

Ключові слова: рідина, параболічний резервуар, резонанс, пружинне закріплення.

We consider a nonlinear problem of liquid sloshing dynamics in absolutely rigid parabolic reservoir, attached by spring to immovable point. The nonlinear oscillations of this system are studied for the case when an external harmonic force is applied to the movable reservoir. Mathematical model of combined motion of rigid parabolic tank, filled by liquid with a free surface and fixed by spring to immovable point, is constructed. Investigation is done on the basis of efficient nonlinear multimodal model, which considers combined motion of reservoir and free surface of the liquid. The problem is solved on the basis of variational algorithms, which are based on mathematical statement of the problem in the form of the Hamilton-Ostrogradskiy variational principle. The natural frequencies of mechanical system parabolic reservoir, partially filled with ideal liquid and fixed by spring to immovable point, were determined. Analysis showed that due to combined character of motion of system components normal frequencies of this system differ from partial frequencies. We investigate system behavior in different frequency ranges for confirmation of variation of system resonant properties. It is shown that resonance manifests sharply on resonant frequency, which corresponds to domination of elastic oscillations of tank.

Key Words: liquid, parabolic reservoir, resonance, elastic fixation.

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

1. Вступ

Досліджується нелінійна задача коливань параболічного резервуара з рідиною із вільною поверхнею при наявності пружного закріплення до нерухомої точки. Сумісні коливання системи параболічний резервуар – рідина при наявності пружного закріплення мають власні частоти, які значно відрізняються від парціальних частот коливань. Метою статті є визначення характерних режимів розвитку коливань системи, рух якої обмежено пружним закріпленням.

2. Постановка задачі та її розв'язання

Дискретна модель механічної системи «резервуар – рідина з вільною поверхнею» відносно незалежних параметрів a_i – коефіцієнтів

розкладу в ряд збурення вільної поверхні рідини ξ за формами коливань вільної поверхні ψ_i та ε_i – компонент вектору переміщення центру незбуреної вільної поверхні рідини базується на основі варіаційного принципу Гамільтона-Остроградського, методу модальної декомпозиції та методу [1-2], який дозволяє повністю виключити кінематичні граничні умови на вільній поверхні рідини:

$$\sum_i \ddot{a}_i \left\{ V_{ir}^1 + \sum_j a_j V_{irj}^2 + \sum_{j,k} a_j a_k V_{irjk}^3 \right\} + \ddot{\xi} \cdot \left\{ \bar{U}_r^1 + \sum_i a_i \bar{U}_{ri}^2 + \sum_{i,j} a_i a_j \bar{U}_{rij}^3 + \sum_{i,j,k} a_i a_j a_k \bar{U}_{rijk}^4 \right\} =$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{i,j} \dot{a}_i \dot{a}_j V_{ijr}^{2*} + \sum_{i,j,k} \dot{a}_i \dot{a}_j a_k V_{ijk}^{3*} + \\
 &+ \dot{\varepsilon} \left\{ \sum_i \dot{a}_i \bar{U}_{ir}^{2*} + \sum_{i,j} \dot{a}_i a_j \bar{U}_{irj}^{3*} + \sum_{i,j,k} \dot{a}_i a_j a_k \bar{U}_{ijk}^{4*} \right\} - \\
 &- g \left\{ \sum_i a_i W_{ir}^2 + \frac{3}{2} \sum_{i,j} a_i a_j W_{ijr}^3 + 2 \sum_{i,j,k} a_i a_j a_k W_{ijk}^4 \right\} \\
 &\frac{\rho}{(M_{res} + M_{liq})} \left\{ \sum_i \ddot{a}_i \bar{U}_i^1 + \sum_j \ddot{a}_j \bar{U}_j^2 + \sum_j \ddot{a}_j a_k \bar{U}_{ijk}^3 \right\} + \ddot{\varepsilon} + c\varepsilon_y = \\
 &\frac{F}{(M_{res} + M_{liq})} - g\ddot{z}_0 - \frac{\rho}{(M_{res} + M_{liq})} \sum_j \dot{a}_j \dot{a}_j \left\{ \bar{U}_{ij}^2 + 2 \sum_k a_k \bar{U}_{ijk}^3 \right\} \\
 &(\rho - \text{густина рідини, } g - \text{прискорення} \\
 &\text{гравітаційних сил, } M_{res} \text{ та } M_{liq} - \text{маси рідини та} \\
 &\text{резервуару відповідно), } c - \text{коефіцієнт жорсткості} \\
 &\text{пружини.}
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

Власні частоти механічної системи "параболічний резервуар – рідина з вільною поверхнею" при наявності пружного закріплення до нерухомої точки визначаються відповідно до теорії механічних коливань за формулою [3]:

$$\omega_{I,II}^2 = \frac{1}{2} \left(n_1^2 + n_2^2 \pm \sqrt{(n_2^2 - n_1^2)^2 + 4n_1^2 n_2^2 \lambda_1 \lambda_2} \right), \tag{2}$$

де

$$\lambda_1 = \frac{U_1^1}{V_{11}^1}, \lambda_2 = \frac{\rho}{(M_{res} + M_{liq})} U_1^1, n_1 = \frac{\omega_1}{\sqrt{1 - \lambda_1 \lambda_2}},$$

$$n_2 = \frac{\omega_2}{\sqrt{1 - \lambda_1 \lambda_2}}, \quad n_1 \text{ та } n_2 - \text{парціальні частоти}$$

системи резервуар з рідиною та пружинної фіксації відповідно, ω_1 - частота головного тону коливань рідини, ω_2 - частота коливань резервуара з пружинним закріпленням $\omega_2 = \sqrt{c/(M_{res} + M_{liq})}$.

3. Результати розрахунків та їх аналіз

Розглянемо резервуар у формі параболоїда обертання $r = \sqrt{z + H}$ з вертикальною віссю OZ, який здійснює поступальні рухи в горизонтальній площині. Відносна глибина заповнення рідини $H/R_0 = 1$, співвідношення мас резервуару та рідини $M_{res}/M_{liq} = 0,5$. До стінки резервуара прикладена горизонтальна сила, що змінюється за гармонічним законом $F = A \cos pt$, початкове збурення вільної поверхні відсутнє. У всіх розглянутих в подальшому випадках амплітуда зовнішньої горизонтальної сили, що діє на бак,

обирається так, щоби коливання вільної поверхні рідини знаходились у нелінійному діапазоні зміни амплітуд хвиль, тобто збурення вільної поверхні на стінках бака досягали величин $(0,2 \div 0,25)R$. На графіках амплітуди ξ представлені у безрозмірному вигляді відносно характерного розміру системи R_0 радіуса резервуару, час відносно періоду коливань $2\pi/\omega_1$ першої антисиметричної форми вільної поверхні ($\omega_1 = 2.7521$ Гц). Крок чисельного інтегрування обирався на основі періоду коливань вищої гармоніки спектру і приймався $\Delta t = 0,04$ с.

Для системи з такими характеристиками парціальна частота рідини $1,4349\omega_1$ Гц та завжди є постійною величиною, а парціальна частота резервуару з пружиною збільшується при збільшенні жорсткості пружини та має мінімальне значення 0 Гц при відсутності пружинного закріплення.

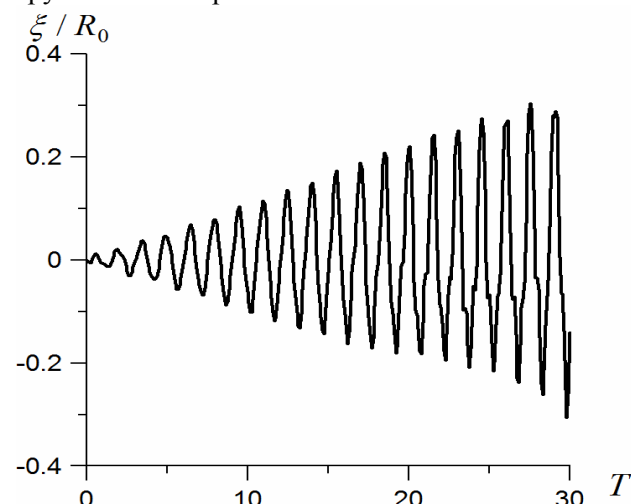


Рис. 1 Зміна збурень вільної поверхні для $F_x = 0,04 \cos 0,6643\omega_1 t$.

Розглянемо коливальний рух системи для коефіцієнта жорсткості $C = 22148$ Н/м у випадку дії гармонічної сили з частотою, близької до власної частоти ω_I , яка пов'язана з домінуванням пружних коливань резервуара $F_x = 0,01 \cos 0,6643\omega_1 t$ (Рис. 1,2). Спостерігається суттєвий вплив вищих гармонік. Починаючи з 20 - го періоду коливань різко зростають амплітуди першої осе симетричної форми та вищих гармонік. Зростає і повна енергія системи (Рис.3). В системі спостерігається резонансний режим. Це підтверджує і структура частотного спектру (Рис. 2), коли домінуючі гармоніки зосереджені в

околі частоти зовнішньої сили ($0,6643\omega_1$). При збільшенні амплітуди зовнішньої сили період амплітудної модуляції зменшується.

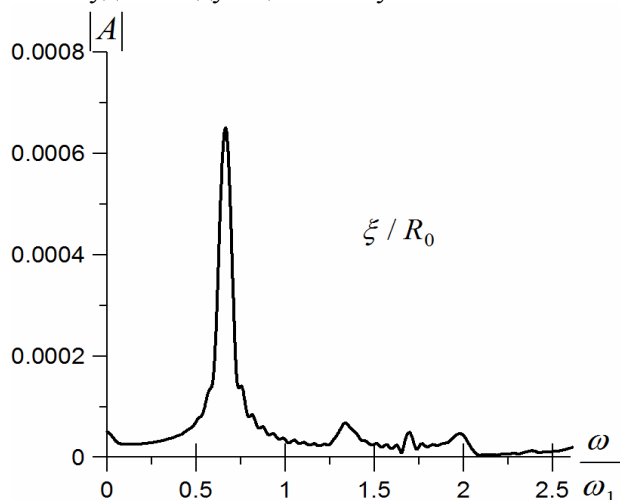


Рис. 2 Частотний спектр при збуренні руху системи $F_x = 0,04 \cos 0,6643\omega_1 t$.

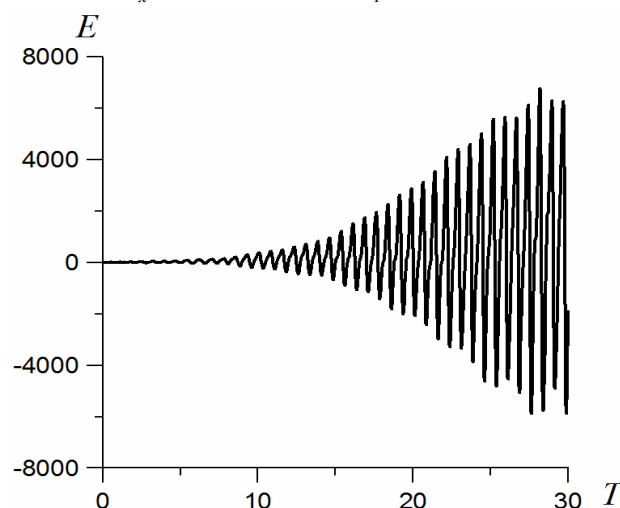


Рис. 3 Зміна повної енергії системи для $F_x = 0,04 \cos 0,6643\omega_1 t$.

При зменшенні або збільшенні частоти зовнішньої сили на 10 відсотків резонансні ефекти не проявляються. Висота хвиль на поверхні взагалі не виходить в нелінійний діапазон. Коливальний рух вільної поверхні для зовнішньої сили $F_x = 0,04 \cos 0,6\omega_1 t$ і $F_x = 0,04 \cos 0,72\omega_1 t$ відбуваються із вираженою амплітудною модуляцією і значним дрейфом середнього значення. При збільшенні частоти зовнішнього навантаження картина хвиле утворення на вільній поверхні схожа, відмінність полягає лише у збільшенні періоду амплітудної модуляції. Якщо на систему с заданими параметрами діяти гармонічною силою $F_x = 0,04 \cos \omega_1 t$ із частотою збурень в околі

парціальної частоти вільної поверхні, то резонансні ефекти також не спостерігаються і рівень збурень вільної поверхні знаходиться в лінійному діапазоні.

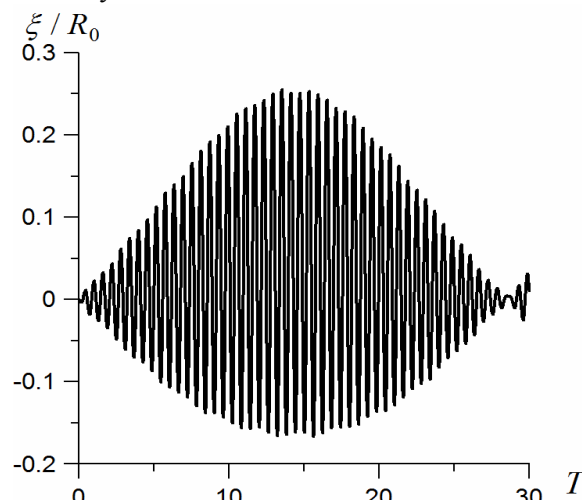


Рис. 4 Зміна збурень вільної поверхні для $F_x = 0,04 \cos 1,7016\omega_1 t$.

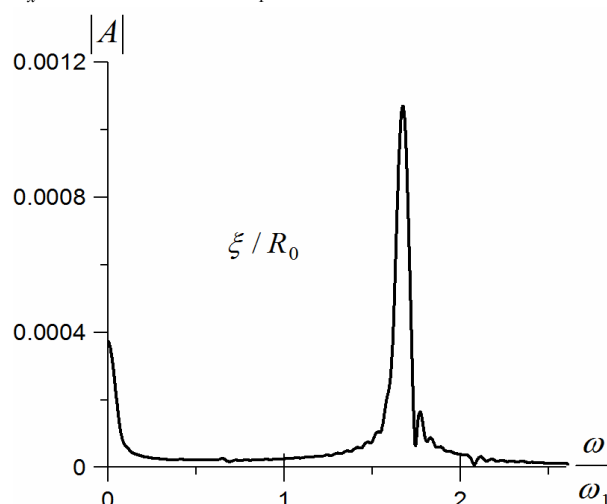


Рис. 5 Частотний спектр при збуренні руху системи $F_x = 0,04 \cos 1,7016\omega_1 t$.

Розглянемо коливальний рух системи для коефіцієнта жорсткості $C=22148$ Н/м у випадку дії гармонічної сили з частотою, близької до власної частоти ω_{II} , яка пов'язана з домінуванням коливань вільної поверхні $F_x = 0,04 \cos 1,7016\omega_1 t$ (Рис. 4,5). Висота горбів хвиль більша за глибину впадин, що є характерним для нелінійних коливань. Із Рис. 4 бачимо, що коливання рідини характеризуються чітко вираженою амплітудною модуляцією та зміною у часі середнього. Це підтверджує і структура частотного спектру (Рис. 5), коли домінуючі гармоніки зосереджені в околі частоти

зовнішньої сили ($1,7016\omega_1$), а гармоніки на низьких частотах ($\omega \leq 0,3\omega_1$) у 5 разів менше домінуючих гармонік. Для коливального руху системи з такими параметрами характерне явище антирезонансу (Рис. 6), коли амплітуда збурень вільної поверхні на деякому проміжку часу спадає до рівня $\xi = (0,01 \div 0,03)R$, тобто значення амплітуди падає в десять разів і тримається на інтервалі 3 періодів коливань за першою антисиметричною формою.

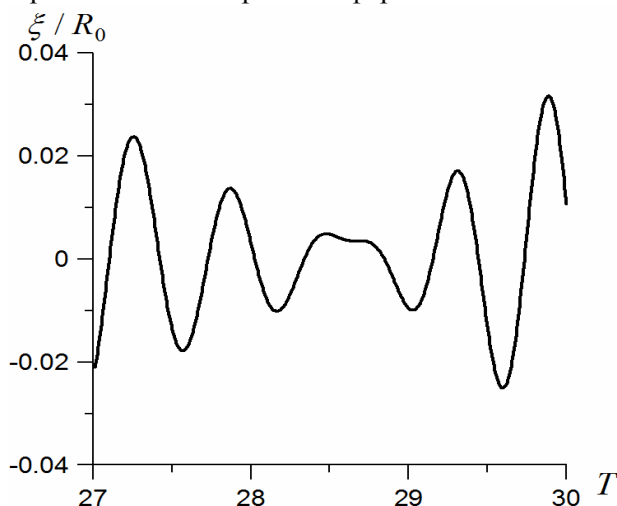


Рис. 6 Явище антирезонансу при збуренні руху системи $F_x = 0,04 \cos 1,7016\omega_1 t$.

При зменшенні або збільшенні ($1,87\omega_1$) частоти зовнішньої сили на 10 відсотків збурення вільної поверхні не перевищують $0,04R$. Для такого руху характерна наявність модуляції та зміна середнього значення у часі. Резонансні ефекти у системі з такими параметрами не з'являються.

4. Висновки

Проведено дослідження сумісного руху механічної системи параболічний резервуар – рідина при наявності пружного закріплення під дією зовнішнього періодичного навантаження. Нелінійні коливання при врахуванні сумісності руху і наявності пружини мають власні частоти, які значно відрізняються від парціальних частот коливань. Резонансні властивості системи суттєво проявляються на частотах, що пов'язані з домінуванням пружних коливань, а не на частотах, які відповідають домінуванню коливань вільної поверхні рідини. Для нелінійних коливань на домінуючих частотах рідини характерні наявність ефектів амплітудної модуляції, зміна у часі середнього значення, вплив вищих форм коливань.

Список використаних джерел

1. *Limarchenko O.*, Rotational motion of structures with tanks partially filled by liquid / – O. Limarchenko, G. Matarazzo, V. Yasinsky – Kyiv: FADA, 2003. – 286 p.
2. *Limarchenko O.*, Forced oscillations of liquid in a reservoir of paraboloidal shape/ *Limarchenko O., Semenova I.*// – Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології 2013, вип. 18, С. 106-112
3. *Болотин В.В.* Динамическая устойчивость упругих систем /*Болотин В.В.*– Москва, 1956. – 600 с.

References

1. LIMARCHENKO, O., MATARAZZO, G., YASINSKI, V. (2003) *Rotational motion of structures with tanks partially filled by liquid*. Kyiv.
2. LIMARCHENKO O, SEMENOVA, I. (2013) *Forced oscillations of liquid in a reservoir of paraboloidal shape*. – Physico-mathematical modelling and informational technologies. – 18. – p.106-112
3. BOLOTIN, V. (1956) *Dynamic stability of elastic systems*. – M:GITTL

Надійшла до редколегії 25.09.15

УДК 539.5

Шалденко О.В.¹, аспірант,
Гуржій О.А.², д.ф.-м.н., с.н.с.

Аналіз процесів теплопередачі в криволінійному каналі при малих числах Рейнольдса

Національний технічний університет України
"КПІ", 03056, м.Київ, пр. Перемоги 37, корп.5

¹ e-mail: o.shaldenko@gmail.com

² e-mail: a.gourjii@gmail.com

O.V. Shaldenko¹, graduate student,
A.A. Gourjii², Dr. Sci. (Phys.-Math.), Sen. Res.

Analysis of heat transfer processes in the curvilinear channel at low Reynolds numbers

National Technical University of Ukraine "KPI",
03056, Kiev, 37 Pobedy adv., bld.#5

¹ e-mail: o.shaldenko@gmail.com

² e-mail: a.gourjii@gmail.com

Розглядається задача теплопередачі від однорідної в'язкої нестисливої рідини всередині двовимірного криволінійного каналу в зовнішнє тверде середовище при числах Рейнольдса $Re < 650$. Показано, що локалізовані вихрові структури, які з'являються в кутових точках течії, збільшують конвективні теплові потоки усередині каналу і дифузійні потоки в зовнішнє середовище в порівнянні з прямолінійним каналом однакової довжини.

Ключові слова: процеси теплопередачі, двовимірний канал, в'язка рідина.

The problem of heat transfer from a homogeneous viscous incompressible fluid inside a two-dimensional curved channel into the outer solid medium at low Reynolds number $Re < 650$ and Prandtl number $Pr = 7$ is considered. Analysis of the problem deals with the simultaneous solution of the hydrodynamic problem in terms of "stream function - vorticity" and the convection-diffusion heat transfer problem in a dimensionless form with appropriate initial and boundary conditions. The problem was solved numerically on a uniform grid applying the simple explicit method for solving differential equations of parabolic type and the successive over-relaxation method for solving differential equations of elliptic type. It is shown that the heat transfer processes in a curvilinear channel for Reynolds numbers $Re > 40$ goes more extensively in comparison with the straight channel of the same length. Analysis of the results shows that the system of localized vortex structures appears in the corner regions of curved channel at Reynolds numbers $Re > 65 \dots 100$. These vortex structures form transverse convective heat flux, which increases the temperature gradient at the boundaries of the channel. Intensity of heat flux for $Re > 150 \dots 200$ in the curved channel increases significantly compared to the straight-line channel by increasing the pressure gradient required for the formation of the corresponding fluid flow at the inlet of the channel.

Key Words: heat transfer processes, two-dimensional channel, viscous flow.

Статтю представив докт. фіз.-мат. наук, проф. Жук Я.О.

1. Вступ

Стрімкий розвиток сучасних технологій ставить перед дослідниками ряд задач, пов'язаних з розробкою мініатюрних систем, що дозволяють на електронному рівні контролювати і управляти різними процесами в хімічних технологіях [1]. Багато хімічних реакцій проходять з виділенням (поглинанням) тепла, тому проблема відведення тепла в хімічних чіпах (мікропроцесорах) представляє важливу наукову і технічну проблему.

Конструктивною особливістю мініатюрних теплообмінників є наявність системи мікроканалів, в яких формується течія теплоносія при малих числах Рейнольдса Re . У каналах має місце поздовжній конвективний тепловий потік і дифузійний поперечний потік в зовнішнє

середовище [2]. Одне з рішень зазначеної проблеми пов'язане з формуванням всередині теплообмінника течії з поперечним конвективним потоком, який може збільшити градієнт температур на границі течії. У цьому випадку тепловіддача технічного пристрою може істотно збільшитися.

2. Чисельна модель течії

Розглянемо двовимірну задачу теплопередачі від рідкого теплоносія в криволінійному каналі, заповненому в'язкою, однорідною, нестисливою рідиною, при малих числах Рейнольдса Re в зовнішнє тверде середовище з незмінними фізичними властивостями (рис.1).

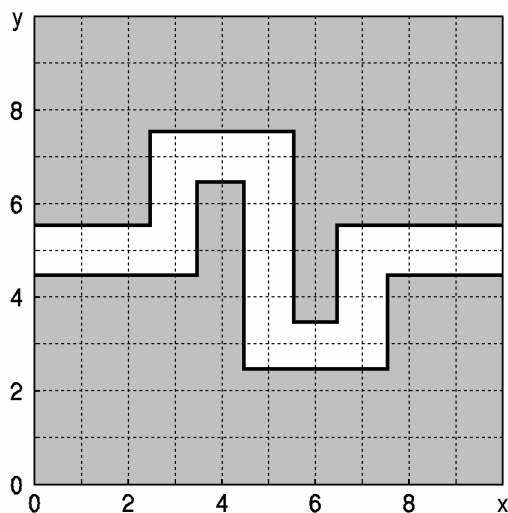


Рис. 1. Геометрія криволінійного каналу

Основними рівняннями, що описують фізичні процеси в каналі, є рівняння Нав'є-Стокса, рівняння нерозривності і рівняння конвективно-дифузійного переносу:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = -\nabla p + \frac{1}{\text{Re}} (\Delta \mathbf{U}), \quad \nabla \mathbf{U} = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) T = \frac{1}{\text{Pe}} (\Delta T), \quad (1)$$

де $\mathbf{U}(x, y, t)$ – поле швидкості течії, $p(x, y, t)$ – поле тиску, $T(x, y, t)$ – поле температур, $\text{Re} = U_m D / \nu$ – число Рейнольдса, $\text{Pe} = U_m D / \alpha$ – число Пекле. Тут U_m – характерна швидкість течії на вході каналу, D – ширина каналу, α – коефіцієнт теплопровідності середовища.

Наведені рівняння пронормовані на D , U_m , ρ – щільність рідини, ΔT – різниця температур рідини на вході каналу і температури середовища на нескінченному віддаленні від каналу, γ_F – теплопровідність рідини.

Гідродинамічна задача розв'язувалася в термінах “функція току – завихореність”, основні рівняння якої безпосередньо впливають з системи рівнянь (1):

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \omega = \frac{1}{\text{Re}} (\Delta \omega), \quad \Delta \Psi = -\omega, \quad (2)$$

де $\omega(x, y, t)$ – поле завихореності, $\omega = \text{rot} \mathbf{U}$, $\Psi(x, y, t)$ – поле функції току, яка в двовимірному випадку зв'язана з проекціями поля швидкості $\{U, V\}$ виразами

$$U = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad V = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}. \quad (3)$$

При необхідності, для заданого розподілу поля швидкості можна визначити розподіл поля тиску

$$\Delta p = -\left\{ \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial U}{\partial y} \frac{\partial V}{\partial x} \right\}. \quad (4)$$

Задача розв'язувалася чисельно з використанням простого явного методу з різницями другого порядку проти потоку і першого порядку по часу для розв'язку диференціальних рівнянь параболічного типу з консервативною формою запису рівнянь, і метод послідовної верхньої релаксації для розв'язку диференціальних рівнянь еліптичного типу з дискретизацією просторових похідних різницями другого порядку [3].

В якості початкових умов в гідродинамічній задачі задається розподіл полів $\Psi(x, y, 0)$, $\omega(x, y, 0)$ для ламінарної течії всередині каналу з максимальною осьовою швидкістю U_m на вході каналу, які виходять після розв'язку відповідної стаціонарної задачі (2) для заданої геометрії течії. Для теплової задачі початковими умовами є $T(x, y, 0) = 0$ скрізь, крім входу каналу, де $T(0, y, 0) = 1$. У зовнішній області початкова температура покладається $T(x, y, 0) = 0$.

Граничними умовами гідродинамічної задачі на вході і виході каналу є розподіл полів Ψ і ω , які відповідають ламінарній течії рідини, а на твердих поверхнях – умова прилипання рідини. Для теплової задачі граничними умовами на стінках каналу є рівність температур і теплових потоків

$$T_F|_G = T_S|_G, \quad \frac{\partial T_F}{\partial n}|_G = \gamma \frac{\partial T_S}{\partial n}|_G. \quad (5)$$

де T_F , T_S – поле температур в рідині і в зовнішньому середовищі, відповідно; $\gamma = \gamma_S / \gamma_F$ – відношення теплопровідності рідини і зовнішнього середовища.

Фізичне обґрунтування, математичні формулювання і деякі подробиці задання початкових і граничних умов для фізичних полів $U(x, y, t)$, $V(x, y, t)$, $p(x, y, t)$, $T(x, y, t)$, $\Psi(x, y, 0)$ і $\omega(x, y, 0)$ в розглянутій задачі можна знайти в [2-4].

Чисельний розв'язок задачі тестувався на аналітичному розв'язку [5] гідродинамічної задачі для ламінарної течії в'язкої нестисливої рідини усередині прямолінійного каналу і аналітичному розв'язку [6] одновимірної нестационарної задачі дифузійної теплопровідності. Аналіз стійкості простого явного методу [3] на рівномірній сітці з кроком дискретизації $\delta = 0.05$ просторових змінних показав, що схема є стійкою для чисел Рейнольдса $\text{Re} < 1000$. Дослідження показали, що чисельні дані в тестових задачах знаходяться в гарній відповідності до аналітичних розв'язків.

3. Результати чисельного моделювання

Розглянемо процеси теплопередачі в криволінійному каналі (рис.1), заповненому рідиною

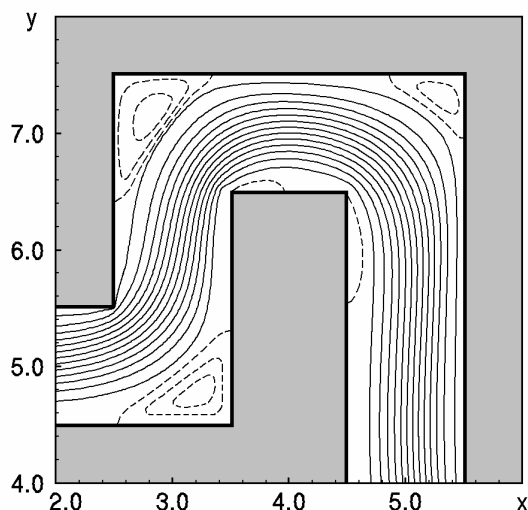


Рис.2. Розподіл функції току на ділянці каналу при $Re=100$

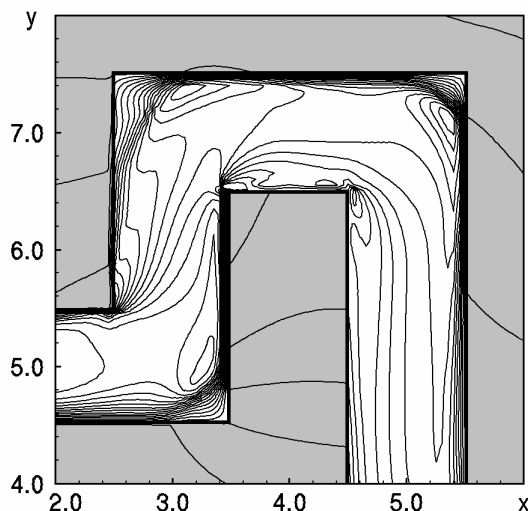


Рис. 3. Розподіл поля температур на ділянці каналу при $Re=100$

(вода) з коефіцієнтом кінематичної в'язкості $\nu=10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, щільністю $\rho=10^3 \text{ кг}/\text{м}^3$, коефіцієнтом температуропровідності $\alpha_F=1,43 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ і коефіцієнтом теплопровідності $\gamma_F=0,6 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{град})$.

Нехай параметри зовнішнього середовища відповідають фізичним параметрам повітря з $\alpha_S=1,9 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$ і $\gamma_S=0,026 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{град})$. У цьому випадку число Прандтля для розглянутої течії $Pr = 7$, а $\gamma = \gamma_S / \gamma_F = 23$.

При числах Рейнольдса $Re < 40$ в криволінійному каналі формується безвихрова, стаціонарна, ламінарна течія, в якій лінії току плавно огинають границі течії. При збільшенні швидкості течії ($Re=40..120$) в каналі, в областях за вигинами границь спостерігається поява вихрових зон. Рис.2 ілюструє характерний випадок появи стаціонарних вихрових зон на початковій ділянці каналу. Рідина рухається зліва направо. На рисунку суцільними лініями нанесені лінії току з кроком дискретизації $\Delta\psi = 0.05$, а штриховими лініями показані лінії току в кутових областях з кроком дискретизації $\Delta\psi = 0.005$. У літературі такі вихрові структури часто називають вихорами Моффатта [7].

При збільшенні швидкості течії ($Re = 100 \dots 650$) кутові вихори втрачають стійкість і починають поступово зміщуватися уздовж потоку, здійснюючи коливальні рухи.

Аналіз розподілу ліній току течії дозволяє зробити висновок, що наявність кутових вихрових структур звужує центральну частину потоку і зміщує її до бічних поверхонь каналу. Ця тенденція призводить до збільшення градієнта поля температур близько обмежуючих поверхонь і, як результат, до збільшення дифузійного теплового потоку через бічні стінки каналу.

На рис.3 показано розподіл поля температур з кроком дискретизації $\Delta T = 0.05$, яке виникає для течії на рис.2. Видно, що в вихрових областях є скупчення охолодженої рідини, в той час як гаряча рідина за інерцією зміщується в бік обмежуючих поверхонь, формуючи великий градієнт поля температур у порівнянні з градієнтом поля температур в прямолінійному каналі з аналогічними фізичними параметрами.

Зміна напрямку потоку в криволінійному каналі вимагає додаткової різниці тисків на вході і виході каналу для того, щоб сформувати течію з аналогічною поздовжньою швидкістю, що відповідає течії в прямолінійному каналі. На рис.4 показані результати розрахунків градієнта тисків, усередненого по всій довжині каналу, для криволінійного каналу (штрихова лінія) і прямолінійного каналу (суцільна лінія, аналітичний розв'язок дивись в[5]). При проведенні порівняльного аналізу параметрів каналів довжина прямолінійного каналу вибиралася рівній довжині осрової лінії криволінійного каналу. На рис.4. видно, що зі збільшенням швидкості течії різниця між кривими зростає, оскільки на формування локалізованих вихрових структур потрібна певна енергія.

На рис.5. показана залежність усередненого по всій довжині теплового потоку через бічні поверхні каналу для течій, зазначених на рис.4. Зі збільшенням швидкості течії рідина швидше протікає через канал. Цим пояснюється деяке зниження теплового потоку зі збільшенням числа Re для прямолінійного каналу. З іншого боку, тепловий потік в криволінійному каналі постійно зростає в розглянутому діапазоні чисел Рейнольдса Re . Видно, що при $Re > 250 \dots 300$ дифузійний тепловий потік через обмежуючі

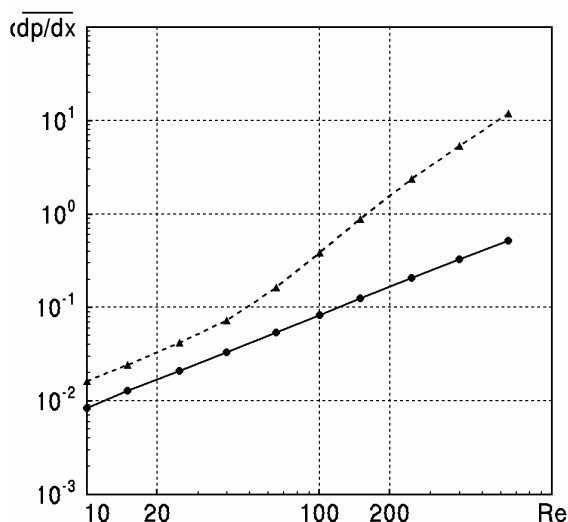


Рис.4. Залежність усередненого по довжині каналу градієнта тиску від числа Re

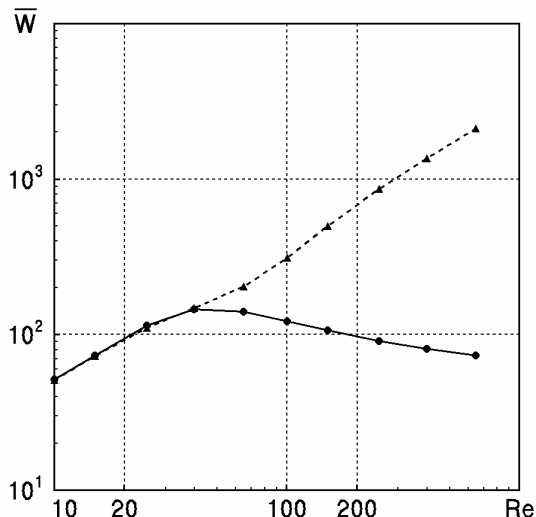


Рис.5. Залежність усередненого по довжині каналу теплового потоку від числа Re

поверхні в криволінійному каналі приблизно на порядок вище, ніж відповідний тепловий потік криволінійного каналу.

4. Висновки

У роботі розв'язана задача конвективно-дифузійної теплопередачі від рідини усередині криволінійного каналу в зовнішню тверде середовище. Показано, що в криволінійному каналі при числах Рейнольдса $Re > 40$ в кутових областях виникає система локалізованих вихрових структур, яка формує конвективний тепловий потік, спрямований до стінок каналу.

Це призводить до збільшення теплового потоку через обмежуючі поверхні.

Встановлено, що в області $Re < 40$ теплові параметри криволінійного каналу практично не відрізняються від параметрів криволінійного каналу. З іншого боку, в області значень $Re > 150 \dots 200$ інтенсивність теплових потоків криволінійного каналу істотно зростає в порівнянні з прямолінійним каналом за рахунок збільшення градієнта тиску, необхідного для формування відповідної швидкості течії на вході каналу.

References

Список використаних джерел

1. Stroock A.D. Chaotic mixer for microchannel / A.D.Stroock, S.K.W.Dertinger, A.Adjari et al. // Science. – 2002. – V.295. – p.647-651.
2. Эккерт Э.Р. Теория тепло- и массообмена / Э.Р.Эккерт, Р.М.Дрейф // М.: Госэнергоиздат, 1961. – 680с.
3. Роуч П. Вычислительная гидромеханика / П.Роуч // М.: Мир, 1980 – 616с.
4. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. Т1 / К.Флетчер // М.: Мир, 1991 – 504с.
5. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т.1 / Л.И.Седов // М.: Наука, 1970 – 492с.
6. Лыков А.В. Теория теплопроводности / А.В.Лыков // М.: Высшая школа, 1967 – 600с.
7. Moffatt H.K. Viscous and resistive eddies near a sharp corner / H.K.Moffatt // Journal of Fluid Mechanics. – 1964. – V.18. – p.1-18.
1. STROOCK, A.D., DERTINGER, S.K.W., ADJARI, A. et.al. (2002) Chaotic mixer for microchannel. *Science*. 295. p.647-651.
2. EKKERT, E.P., DREIF, R.M. (1961) *Teoriya teplo- i massoperenosa*. Moskva: Gosener-goizdat.
3. ROUCH, P. (1980) *Vychislitel'naya gidro-mechanika*. Moskva: Mir
4. FLETCHER, K. (1991) *Vychislitel'nye metody v dinamike zhidrostey*. T1. Moskva: Mir.
5. SEDOV, L.I. *Mehanika sploshnoi sredy*. T1. Moskva: Nauka.
6. LYKOV, A.V. *Teoriya teploprovodnosti*. Moskva: Vysshaya shkola.
7. MOFFATT, H.K. (1964) *Viscous and resistive eddies near a sharp corner*. Journal of Fluid Mechanics. 18. p.1-18.

Надійшла до редколегії 29.09.2015

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 004.8

Бармак О.В.¹, д.т.н., доцент
Крак Ю.В.², д.ф.-м.н., проф.

Інформаційна технологія для класифікації слабо розділених елементів дактильної абетки жестової мови

¹ Хмельницький національний університет,
29000, м. Хмельницький, вул. Інститутська, 11,
e-mail: barmak@svitonline.com

² Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4д,
e-mail: yuri.krak@gmail.com

O.V.Barmak¹, PhD in Tech., ass.prof.
Yu.V.Krak², PhD in Math., prof.

Information technology for classifying slightly separate elements sign language alphabet

¹ Khmelnytskyi National University, 29000,
Khmelnytskyi, Instytutska str., 11,
e-mail: barmak@svitonline.com

² Taras Shevchenko National University of Kyiv,
83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: yuri.krak@gmail.com

Розглядається створення інформаційної технології ідентифікації знаків дактильної абетки для української жестової мови. Інформаційна технологія базується на результатах аналізу інформативності ознак, запропонованих для розпізнавання. Технологія розпізнавання враховує вимоги відтворення жестового мовлення людьми з різними розмірами рук та на різних фокусних відстанях.

Ключові слова: дактильна абетка, інформаційна технологія, розпізнавання.

Information technology for Ukrainian sign language alphabet identification is creation. Information technology is basing on an analysis of informative signs features for recognition, such as human hand geometric and topological parameters, descriptors of contour analysis, dynamical changes etc. Advantages offered dactyl alphabet recognition technology lies in the fact that the requirements captured people of reproduction sign broadcasting the hands with a different sizes and at different focal lengths.

For testing information technology were taken by a group of people from different age and sex characteristics. In demonstrations on different focal length as man and as woman correct identification was obtained in 80-87% of cases. For a group of people who know sign language (teachers of special schools and professional sign language interpreters) the recognition rate was 98%. The results that was obtained in this paper a demonstrate the effectiveness and good quality of the proposed methods.

Key Words: sign language, information technology, recognition.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Хусаїнов Денис Ях'євич

ВСТУП

Дактильна абетка жестової мови глухих є засобом, за допомогою якого, букви алфавіту подаються у вигляді конфігурацій пальців руки та відображають власні значення мови (прізвища, назви населених пунктів, речовин тощо) тобто ті значення для яких відсутні відповідні позначення у вигляді жестів [1]. Розвиток інформаційних технологій, доступність комунікаційних пристроїв дозволяє запропонувати засоби, які спростили б спілкування між глухими і чуючими людьми.

Дослідження спрямовані на розробку підходів, що дозволять створити доступні засоби

комунікації для глухих людей з метою повноцінного включення їх у суспільство.

Для вирішення задачі розпізнавання дактильної абетки жестової мови з потокового відео зображення проведені дослідження з метою визначення характеристичних ознак подання кисті руки при відтворенні дактилем [2]. Досліджувалося вхідне відео зображення, що містить показ людиною знаків дактильної абетки та певні перетворення зображення, що дозволяють отримати на виході ідентифікований знак (букву) українського алфавіту. Ідентифікація враховувала відтворення дактиля людьми з різними розмірами рук і при фіксації даного процесу з різних фокусних відстаней. На

зображенні виділялася кисть руки і фіксувалися її крайні точки: зверху, ліворуч, унизу й справа. У результаті дослідження отримані наступні групи характеристичних ознак: 1) кут між векторами, проведеними з центру до крайніх точок (x_2, x_3, x_4, x_5); 2) нормована довжина вектору, що проведений з центру до крайніх точок (x_6, x_7, x_8, x_9); 3) компактність, спрямованість, витягнутість, відношення ширини до висоти ($x_{10}, x_{11}, x_{12}, x_1$); 4) дескриптори контурного аналізу ($x_{49}, x_{50}, x_{51}, x_{52}$); 5) ознака динамічності дактилеми (x_0) [2].

Аналіз дактилем з амплітудою руху, ознакою яких є траєкторії переміщення координат центра мас руки, показав стійку ідентифікацію дактилем Д, З і Б. Дактилеми Й, К, Ц, Щ, Ї, Є запропоновано ідентифікувати як нерухомі, але при цьому враховувати наявність траєкторії (це дозволяє розділити однакові по конфігурації руки дактилеми: І(Ї), И(Й), Ш(Щ)).

У результаті аналізу статичних дактилем отримано, що ознака x_1 дозволяє стійко ідентифікувати підмножину дактилем {Б, Ш, К, Ц}. Ознака x_{10} дозволяє визначити дактилему Т, а ознака x_{12} дактилему Г.

Для множини дактилем, що не ідентифікується вище наведеними способами, проведено аналіз інформативності характеристичних ознак за вище наведеними групами. В результаті отримано, що найефективнішими ознаками є ознаки з групи 4 (дескриптори контурного аналізу: ($x_{49}, x_{50}, x_{51}, x_{52}$))[2,3].

Постановка задачі. Запропонувати інформаційну технологію ідентифікації знаків дактильної абетки для української жестової мови. Інформаційна технологія повинна враховувати вимоги відтворення жестового мовлення людьми з різними розмірами рук та на різних фокусних відстанях

ОПИС ІНФОРМАЦІЙНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ

Запропоновано інформаційну технологію, що полягає у побудові каскадного класифікатора, за допомогою якого множина дактилем розбивається на стало роздільні підмножини. У цих підмножинах дактилеми роздільні дещо менше, тому запропоновані інші підходи для їх ідентифікації.

Процес отримання з вхідного відео потоку, що містить показ дактилем української дактильної

абетки, на виході ідентифікованого символу-дактиля полягає у наступних перетвореннях: блок 1 – забезпечення відео потоку, що містить показ елементів дактильної абетки, виділення області кисті руки; блок 2 – отримання параметрів моделі руки ($x_1, x_{11}, x_{12}, x_{49}, \dots, x_{52}$); блок 3 – аналіз динамічності дактилеми; блок 4 – визначення підмножини, до якої належить дактилема; блок 5 – розбиття множини слабо роздільних дактилем за допомогою гіперплощинної класифікації; блок 6 – ідентифікація дактилеми з обмеженої підмножини.

Блок 1 (вхідна інформація). Інформаційна технологія забезпечує: 1) захоплення відеопотоку з web-камери та 2) завдання порогових параметрів, що залежать від середовища в якому проводиться відео фіксація.

Блок 2. Інформаційна технологія забезпечує: 1) попередню обробку зображення (відділення області руки, перетворення над зображенням); 2) подання параметрів моделі руки. Попередня обробка зображення полягає у виконанні наступних кроків: переведення зображення у сірі тони; переведення зображення у чорно-білі кольори; переведення зображення в формат HSV; виділення області руки на зображенні.

Блок 3. Інформаційна технологія забезпечує визначення ознаки статичності чи динамічності дактилеми (ознака x_0). Алгоритм забезпечує визначення наступних значень ознаки: $x_0 = 0$ – статична дактилема; $x_0 = 1$ – динамічна дактилема Д; $x_0 = 2$ – динамічна дактилема З; $x_0 = 3$ – динамічна дактилема Б; $x_0 = 4$ – динамічні дактилеми Ї, Й, Щ, К, Є.

Блок 4. Інформаційна технологія забезпечує віднесення статичної дактилеми до певної підмножини дактилем. Згідно аналізу, використовуючи ознаки x_1, x_{10}, x_{12} , можна розділити статичні дактилеми на наступні підмножини: {Б, Ш, К, Ц}, {Т}, {Г}, {А, В, Е, Є, И, І, Л, М, Н, Р, С, У, Ф, Х, Ч, Ю, Я}. Розділення полягає в аналізі входження ознак x_1, x_{10}, x_{12} у визначені проміжки.

Відзначимо, що одна із підмножин, отриманих у результаті роботи Блоку 4, має досить великий розмір. Дактилеми, що належать цій множині є слабо роздільними.

Блок 5. Інформаційної технології має забезпечити розбиття цієї множини на чотири підмножини меншого розміру. Для цього

пропонується використати гіперплощину класифікацію[3]. За результатами попереднього аналізу, за вектор ознак взято дескриптори контурного аналізу ($x_{49}, x_{50}, x_{51}, x_{52}$).

З аналізу відстаней між дактилемами можна запропонувати наступне розбиття множини дактилем (рис. 1) спочатку на 2 підмножини: $\{E, C, X, Ч, Я, В, Є, Л, У\}$ та $\{И, К, Н, Р, А, І, М, Ф, Ю\}$, а потім кожен з отриманих ще на дві: $\{E, C, X, Ч, Я\}$ і $\{В, Є, Л, У\}$ та $\{И, К, Н, Р\}$ і $\{А, І, М, Ф, Ю\}$.

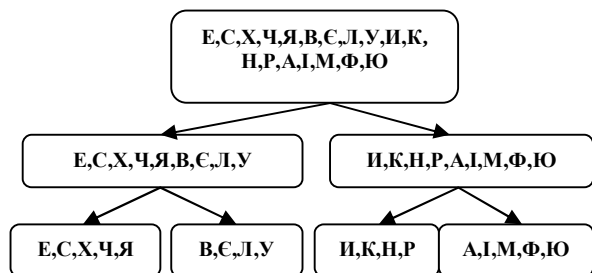


Рис. 1. Розбиття множини слабо роздільних дактилем

Використання гіперплощин класифікації потребує реалізації наступних кроків: 1) визначення гіперплощин, що поділяють на потрібні підмножини і 2) ідентифікація підмножини дактилем до якої відноситься дактильний символ. Нижче наведені алгоритми, що реалізують описані кроки.

Для віднесення вхідної дактилеми до одного із чотирьох підкласів дактилем потрібно визначити три гіперплощини:

- 1) гіперплощину, що розділяє підмножини $\{E, C, X, Ч, Я, В, Є, Л, У\}$ і $\{И, К, Н, Р, А, І, М, Ф, Ю\}$;
- 2) гіперплощину, що розділяє підмножини $\{E, C, X, Ч, Я\}$ та $\{В, Є, Л, У\}$;
- 3) гіперплощину, що розділяє підмножини $\{И, К, Н, Р\}$ та $\{А, І, М, Ф, Ю\}$.

Для отримання вказаних гіперплощин потрібно виконати наступні кроки:

- 1) на вході сформувати матрицю, що складається із $k+1$ стовпчиків (k містять вектори одного класу а один – іншого. Кожен стовпчик є вектором з n параметрами, значеннями котрих є ознаки $x_{49}, \dots, x_{52}$;
- 2) над елементами матриці проведемо наступні перетворення: центрування та нормування у проміжок від 0 до 1;
- 3) доповнимо кожен вектор $n+1$ компонентом, що дорівнює 1 (рядок вільних членів); отриману матрицю з $k+1$ стовпчиками та $n+1$ рядками позначимо як A ;
- 4) знайдемо: A^T , добуток AA^T ; обернену матрицю $(AA^T)^{-1}$; псевдо обернену матрицю:

$$A^+ = A^T (AA^T)^{-1}, \quad \text{проекційну матрицю:} \\ R = A^+ A^{+T};$$

- 5) знайдемо коефіцієнти роздільної гіперплощини як розв'язок рівняння: $Y^T R Y \rightarrow 0$:

5.1) позначимо Y як вектор розмірності $k+l$, причому k елементів цього вектору покладемо рівними 1, а інші l покладемо рівними -1;

5.2) знайдемо розв'язок рівняння $Y^T R Y \rightarrow 0$ скориставшись довільними мінімаксними методами, тобто шукатимемо розв'язок (Y) такий, що мінімізує цільову функцію $Y^T R Y \rightarrow 0$ шляхом підбору компонентів вектору Y зі наступними обмеженнями:

$$\begin{cases} y_i \geq 1, i = \overline{1, \dots, k} \\ y_j \leq -1, j = \overline{k+1, \dots, k+l} \end{cases}$$

- 6) для знайденого Y визначимо коефіцієнти гіперплощини $a: a = A^{+T} Y$.

Вказаним чином отримуємо коефіцієнти трьох гіперплощин: a_1, a_2 и a_3 .

Далі наведемо, з допомогою попередньо отриманих коефіцієнтів трьох гіперплощин ($a_i, i = \overline{1, 3}$), механізм віднесення моделі вхідної дактилеми до однієї з відповідних підмножин. Для цього, послідовно визначимо розв'язок: $q = a_i^T x$, де x – модель вхідної дактилеми ($x_{49}, \dots, x_{52}$). Якщо результат більше нуля, то x відноситься до першого класу, в іншому випадку – до другого класу. Таким чином визначаємо підмножину до якої відноситься модель вхідної дактилеми.

РЕАЛІЗАЦІЯ ІНФОРМАЦІЙНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ ТА ПРОВЕДЕННЯ ЕКСПЕРИМЕНТІВ

Для підтвердження спроможності та ефективності запропонованої інформаційної технології створено відповідне застосування (рис.2).

Інтерфейс застосування складається з наступних блоків: інтерфейс для налаштування та калібрування системи для ідентифікації елементів дактильної мови (1); відображення відео потоку – в системі відображається три відео потоки: вхідний, з виділеними областями точок які відносяться до руки, і відео потік з рукою (2); інтерфейс для налаштування еталонів для контурного аналізу (3); інтерфейс демонстрації характеристик вхідного зображення (4).

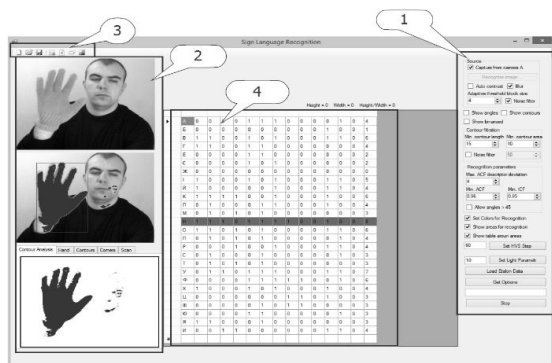


Рис. 2. Застосування для тестування інформаційної технології

Для підтвердження ефективності наведених методів, характеристичних ознак, та для підтвердження ефективності інформаційної технології, за допомогою створеного застосування проведено ряд експериментів. В експериментах приймали участь люди з різними розмірами руки, які відтворювали жести на різних фокусних відстанях від відеокамери.

Аналіз випадків, коли була не правильно розпізнана дактилема, показав наступні групи причин неправильного розпізнавання: швидкий темп виконання дактилеми; виконання подібних жестів; особливості індивідуального відтворення дактилем.

Проаналізувавши дактилеми можна визначити групи подібних жестів. Якщо такі жести відтворювати швидко, або не притримуючись правил виконання, то можливе неправильне розпізнавання жестів.

При тестуванні з експериментальною групою, до якої входили викладачі жестової мови, що відтворювали дактилеми відповідно до правил дактилювання, було досягнуто якості розпізнавання 95–98 % (рис. 3).

Список використаних джерел

1. Краєвський Р.Г. Мова жестів глухих. – К.:Радянська освіта, 1964. – 220с.
2. Крак Ю.В. Аналіз елементів дактильної жестової мови / Ю.В. Крак, Д.В. Шкільнюк // Штучний інтелект. – 2010. – № 3. – С. 322 – 328.
3. Крак Ю.В. Удосконалення методів векторного аналізу та гіперплощинної класифікації для розпізнавання елементів дактильної мови / Ю.В. Крак, Г.І. Кудін, Д.В. Шкільнюк // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки. – 2012. – № 2. – С. 144 – 147.

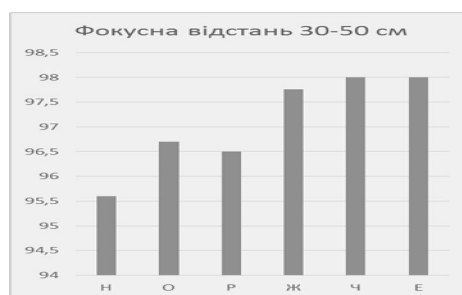


Рис. 3. Розпізнавання дактилем (%) у групі викладачів дактильної мови

ВИСНОВКИ

У роботі запропонована інформаційна технологія для побудови системи класифікації, та ідентифікації дактильної абетки української жестової мови. Класифікацію елементів дактильної абетки проводиться за характеристичними ознаками, які не залежать від індивідуальних особливостей руки та фокусної відстані відео фіксації, що дало змогу визначити класи дактилем та окремі дактилеми, що однозначно розпізнаються за цими ознаками.

Для тестування інформаційної технології були взяті групи людей з різними віковими та статевими характеристиками. При демонстрації дактилем на різних фокусних відстанях було отримано однозначну правильну ідентифікацію у 80–87%. Неправильно розпізнані елементи були у випадку неправильного відтворення дактилем користувачем або деформування їх при швидкому показі. Для групи людей (вчителі спецшкіл), які вміли правильно показувати дактилеми, рівень розпізнавання дактилем становив 98%.

References

1. Kraevskiy R.G. Mova zhestiv gluhyh. – Kyiv : Radianska osvita, 1964.
2. Krak Iu.V, Shkilniuk D.V. (2010) Analiz elementiv daktylnoi gestovoi movy. *Shyuchnyi intelekt*. – № 3. – p. 322 – 328.
3. Krak Iu.V., Kudin G.I., Shkilniuk D.V.(2012) Udoskonalennia metodiv vektornogo analizu ta giperploscynoi klasyfikacii dla rozpoznavania elementiv daktylnoi movy. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Physics & Mathematics*. – № 2. – p. 144 – 147.

Надійшла до редколегії 22.06.15.

УДК 519.62

I.V. Beyko¹, doctor of engineering, professor
P.M. Zinko², PhD., candidate of physical and
mathematical sciences

Solve-operator algorithms in high- precision simulators of complex systems

¹ National Technical University of Ukraine "Kiev
Polytechnic Institute", 37, Prospect Peremohy,
03056, Kyiv-56,

² Taras Shevchenko National University of Kyiv,
4d, Glushkova st., 83000, Kyiv

e-mail: ivan.beyko@gmail.com
petro.zinko@gmail.com

Бейко І.В.¹, д. т. н., професор
Зінко П.М.², к. ф.-м. н, доцент

Алгоритми розв'язуючих операторів у чисельному моделюванні складних систем з підвищеною точністю

¹ Національний технічний університет України
"Київський політехнічний інститут", 03056,
м.Київ-56, пр-т Перемоги, 37

²Київський національний університет імені Тараса
Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т Глушкова, 4д

e-mail: ivan.beyko@gmail.com
petro.zinko@gmail.com

Using solve-operator methods we develop high-precision numerical simulators of graph-operator models made up on basis of their local sub-models approximations by systems of deterministic differential equations with random value parameters on optimized time intervals.

Key Words: solve-operators, complex systems, numerical algorithms for high order accuracy, Cauchy problem.

За допомогою методів розв'язуючих операторів будуються алгоритми обчислення з підвищеною точністю траєкторій граф-операторних моделей із локальними підсистемами, що апроксимуються системами диференціальних рівнянь із випадковими значеннями параметрів на оптимізованих інтервалах часу.

Ключові слова: розв'язуючі оператори, складні системи, числові алгоритми високого порядку точності, задача Коші.

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

We consider a complex system

$$A(x, u, q, \theta) \square (A_1(x, u, q, \theta), \dots, A_{N_k}(x, u, q, \theta)) = 0$$

$$A_k(x, u, q, \theta) \square (A_{k1}(x_{k1}, z_{k1}, u_{k1}, q_{k1}, \theta_{k1}), \dots,$$

$$A_{kN_{ks}}(x_{kN_{ks}}, z_{kN_{ks}}, u_{kN_{ks}}, q_{kN_{ks}}, \theta_{kN_{ks}})),$$

$$(x, u, q, \theta) \square \{(x_k, u_k, q_k, \theta_k)\}_{k=1}^{N_k}, (x_k, u_k, q_k, \theta_k) \square$$

$$\square \{(x_{ks}, u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks})\}_{s=1}^{N_{ks}}$$

of sub-models $A_{ks}(x_{ks}, z_{ks}, u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}) = 0$, $k = \overline{1, N_k}$,
 $s = \overline{1, N_{ks}}$ modeling interdependences between
subsystem's states x_{ks} , parameters q_{ks} , random
values θ_{ks} , controls u_{ks} , and influences z_{ks} ,
 $z_{ks} = \varphi_{ks}(x, u, q, \theta)$ of others subsystems. ET-
adequate simulators of dynamical systems are

defined by restrictions on admissible simulation
errors $E(p)$ of the trajectory x_{ks} simulation
(calculation) under restrictions on computational
burden (time extended) $T(p)$ required to calculate the
trajectory x_{ks} using a simulator with parameters p .
The optimized values of p are defined as
minimizers of the criteria $J(p) = KT(p) + E(p)$ on
selected parameterized sets of simulators (based on
mathematical models with varied aggregation levels,
resolving power, and information sources). The
subsystems optimization realizes by iterative
procedures of detecting those of the subsystems that
have be decomposed and those that have to be
aggregated. Thus simulator optimization procedures
have to detect those of too complicated subsystem's
that have to be replaced by simplified models aiming

to decrease $T(p)$ without particular increasing of the overall error $E(p)$. In this way to simulate trajectories $x_{ks}(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})$ of the complex stochastic subsystem $A_{ks}(x_{ks}, z_{ks}, u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}) = 0$ they perform successful approximations by simple stochastic differential equation subsystems (SDE)

$$\begin{aligned} dx(t) &= a(x(t), u, q, \theta)dt + b(x(t), u, q, \theta)dw(t), \\ x(t) &\in R^n, \quad a(\cdot) = \{a_i(\cdot), i = \overline{1..n}\}, \\ b(\cdot) &= \{b_{ij}(\cdot), i = \overline{1..n}, j = \overline{1..m}\}, \end{aligned}$$

with probability densities $p \square p(x, t | x_0, t_0, u, q, \theta)$ calculated by the Fokker-Planck equation

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} &= - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} [a_i(x(t), u, q, \theta) p(x, t)] + \\ &+ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [\bar{b}_{ij}(x(t), u, q, \theta) p(x, t)]. \end{aligned}$$

For the trajectory $x_{ks}(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})$ approximation they use the Euler-Maruyama simulator

$$\begin{aligned} x(t_{i+1}) &= x(t_i) + a(x(t_i), u, q, \theta)(t_{i+1} - t_i) + \\ &+ b(x(t_i), u, q, \theta)(w(t_{i+1}) - w(t_i)) \end{aligned}$$

or the more accurate Milstein simulator

$$\begin{aligned} x(t_{i+1}) &= x(t_i) + a(x(t_i), u, q, \theta)(t_{i+1} - t_i) + \\ &+ b(x(t_i), u, q, \theta)(w(t_{i+1}) - w(t_i)) + \\ &+ \frac{1}{2} b(x(t_i), u, q, \theta) b^T(x(t_i), u, q, \theta) ((w(t_{i+1}) - \\ &- w(t_i))^2 + t_i - t_{i+1}). \end{aligned}$$

As well simulators of $\tilde{f}(t, x(t))$ are based on the Ito formula

$$\begin{aligned} d\tilde{f}(t, x(t)) &= [\partial_t \tilde{f}(t, x(t)) + \\ &+ a(x(t), u, q, \theta) \partial_x \tilde{f}(t, x(t)) dt + \\ &+ 0,5 b^2(x(t), u, q, \theta) \partial_{xx}^2 \tilde{f}(t, x(t)) dt + \\ &+ b(x(t), u, q, \theta) \partial_x \tilde{f}(t, x(t)) dw(t)]. \end{aligned}$$

In cases of the simplified sub-models:

$$\begin{aligned} dx_{ks}^1(t) &= a_{ks}^1(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})dt + \\ &+ b_{ks}^1(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})dw(t), \\ dx_{ks}^2(t) &= x_{ks}^2(t)(a_{ks}^2(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})dt + \\ &+ b_{ks}^2(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})dw(t)), \\ dx_{ks}^3(t) &= a_{ks}^3(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})x_{ks}^3(t)dt + \\ &+ b_{ks}^3(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})dw(t), \\ dx_{ks}^4(t) &= (A(u(t), q(t), \theta(t), t)x_{ks}^4(t) + \\ &+ c(u(t), q(t), \theta(t), t))dt + B(u(t), q(t), \theta(t), t)dw(t) \end{aligned}$$

with Brownian movements $w(t) \square (w_1(t), \dots, w_m(t))$,

$$\begin{aligned} dw_i(t) &\square w_i(t + dt) - w_i(t), \quad E(dw_i^2(t)) = \sigma_i^2 dt, \\ E(dw_i(t)dw_j(t)) &= 0, \quad i \neq j \end{aligned}$$

simulators are given by simple formulae:

$$\begin{aligned} x_{ks}^1(t) &= x_{ks}^1(t_0) + a_{ks}^1(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})(t - t_0) + \\ &+ b_{ks}^1(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})w(t - t_0), \\ x_{ks}^2(t) &= \exp((a_{ks}^2(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks}) - \\ &- (b_{ks}^2)^2(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks}) / 2)(t - t_0) + \\ &+ b_{ks}^2(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})w(t - t_0)), \\ x_{ks}^3(t) &= x_{ks}^3(t_0) \exp(a_{ks}^3(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})(t - t_0)) + \\ &+ b_{ks}^3(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks}) \times \\ &\times \int_{t_0}^t \exp(a_{ks}^3(u_{ks}, q_{ks}, \theta_{ks}, z_{ks})(t - \tau))dw(\tau), \\ x_{ks}^4(t) &= \Phi(t)x_{ks}^4(t_0) + \\ &+ \Phi(t) \int_{t_0}^t \Psi(\tau)(c(u(\tau), q(\tau), \theta(\tau), \tau) + \\ &+ B(u(\tau), q(\tau), \theta(\tau), \tau))dw(\tau), \end{aligned}$$

with the fundamental matrices $\Phi(\cdot)$ and $\Psi(\cdot)$ of associated homogeneous linear system and it's conjugate system.

In case of general stochastic subsystems the simplified simulators of the trajectories $x_{ki}(t, u_{ki}, q_{ki}, \theta_{ki})$ with given sets of the control functions u_{ki} , random values $\theta_{ki} \in \square^{n_{ki}}$ and with given sets Q_{ki} of unknown admissible values of parameters q_{ki} , we design by simplified systems

$$\begin{aligned} t_0 &= \bar{t}(u_{k0}, q_{k0}, \theta_{k0}) \in R, \\ x_{k0}(t_0) &= \bar{x}_{k0}(t_0, u_{k0}, q_{k0}, \theta_{k0}) \in R^{n_{kx}}, \\ dx_{ki}(t) &= a_{ki}(x_{ki}(t), u_{ki}, q_{ki}, \theta_{ki}, t, \omega_{ki}(x_{ki}(t_i), t_i, q_{ki}, \theta_{kSi}, t))dt, \\ t &\in [t_i, t_{i+1}], \\ t_{i+1} &= \tau(x_{k(i-1)}(t_i), t_i, u_{ki}, q_{ki}, \theta_{ki}, z_{ki}) > t_i, \end{aligned}$$

$$x_{k(i+1)}(t_{i+1}) = \psi(x_{ki}(t_{i+1}), t_{i+1}, u_{k(i+1)}, \theta_{k(i+1)}, z_{k(i+1)})$$

with optimized distribution functions

$$\tilde{F}_{ki}(\tilde{\theta}_{ki} | (x_{k(i-1)}(t_i), t_i, q_{k(i-1)}, \theta_{k(i-1)}, z_{k(i-1)})).$$

To design high precision solve-operator methods of calculating $x_{ksi}(t, \bar{p}, \bar{q}, \bar{\theta})$ with given $\bar{q}$, $\bar{u}$ and $\bar{\theta}$ we implement the asymptotic solve operator [1]

$$\begin{aligned} \bar{x}(t+h) &= p(t+h) + \\ &+ \int_t^{t+h} Q(\tau) (a(p(\tau), \bar{u}, \bar{q}, \bar{\theta}, \tau, \omega(x(t_i), t_i, \bar{u}, \bar{q}, \bar{\theta}, \tau)) - \\ &- dp(\tau) / d\tau) d\tau. \end{aligned}$$

It was proved that the asymptotic equalities

$$\begin{aligned} p(\tau) &= x(\tau) + O(h^l), \\ dQ(\tau) / d\tau &= O(h^k) - \\ -Q(\tau) a'_x(p(\tau), \bar{u}, \bar{q}, \bar{\theta}, \tau, \omega(x(t_i), t_i, \bar{u}, \bar{q}, \bar{\theta}, \tau)), \\ Q(t+h) &= I. \end{aligned}$$

ImPLY the high precision asymptotic equality

$$\bar{x}(t+h) = x(t+h) + O(h^s), \quad s=k+l+1,$$

in the neighborhood of the solution $x = x(\tau) \square x(\tau, \bar{u}, \bar{q}, \bar{\theta})$ of the system

$$\begin{aligned} dx(\tau) / d\tau &= a(p(\tau), \bar{u}, \bar{q}, \bar{\theta}, \tau, \omega(x(t_i), t_i, \bar{u}, \bar{q}, \bar{\theta}, \tau)), \\ \tau &\in (t, t+h) \subset [t_i, t_{i+1}]. \end{aligned}$$

The proposed high order simulators of the asymptotic solve operator

$$\begin{aligned} x(t+mh) &= \\ &= \int_t^{t+mh} [E - (\tau - t - mh) f'_x(p(t+mh), t+mh)] \times \\ &\times [f(p(\tau), \tau) - \dot{p}(\tau)] d\tau + p(t+mh) \end{aligned}$$

to be used on the time intervals $t \in [t_i, t_{i+1}]$ are defined by the approximations $p(\tau)$ of the system

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= f(x(t), t) \square \\ &\square a_{ki}(x_{ki}(t), u_{ki}, q_{ki}, \theta_{ki}, t, \omega_{ki}(x_{ki}(t_i), t_i, q_{ki}, \theta_{ksi}, t)), \\ x(t_0) &= x^0 \in R^n, \quad n_1 \geq 1, \quad t \geq t_0, \end{aligned}$$

with the approximation error

$$\|x(\tau) - p(\tau)\| = O(h^s), \quad \tau \in [t, t+mh],$$

giving the simulators error $O(h^{s+2})$.

Using the function notations

$$\begin{aligned} \theta(\tau; m) &= f'_x(p(t+mh), t+mh) \times \\ &\times [E - (\tau - t - mh)] [f(p(\tau), \tau) - \dot{p}(\tau)], \\ L_k(\tau) &= a_1 \tau^k + a_2 \tau^{k-1} + \dots + a_k \tau + a_{k+1} \end{aligned}$$

we find the function $x(\tau)$ with bounded $x^{(r+1)}(\tau)$ on the interval $[t-mh, t+mh]$

$$\begin{aligned} x(\tau) &= x(t) + (\tau - t)x'(t) + \frac{1}{2!}(\tau - t)^2 x''(t) + \dots \\ &+ \frac{1}{r!}(\tau - t)^r x^{(r)}(t) + O(h^{r+1}). \end{aligned}$$

Thus, the function

$$\begin{aligned} p(\tau) &= x(t) + (\tau - t)x'(t) + \frac{1}{2!}(\tau - t)^2 x''(t) + \dots \\ &+ \frac{1}{r!}(\tau - t)^r x^{(r)}(t), \end{aligned}$$

approximates $x(t)$ on the interval $[t-mh, t+mh]$ with the error $O(h^{r+1})$.

Taking on the interval $[t, t+h]$ the approximation

$$p(\tau) = x(t) + (\tau - t)x'(t) + \frac{1}{2!}(\tau - t)^2 x''(t)$$

with the error $O(h^3)$ we obtain the simplified simulator

$$x(t+h) = p(t+h) + \int_t^{t+h} \theta(\tau; 1) d\tau,$$

with $p(t+h)$ calculated by

$$p(t+h) = x(t) + hf(x(t), t) + \frac{h^2}{2} x''(t). \quad (1)$$

To calculate $\int_t^{t+h} \theta(\tau; 1) d\tau$ by the approximated value $\int_t^{t+h} L_3(\tau) d\tau$ we calculate the solution $a_i, i = 1, \dots, 4$, of the system

$$\begin{cases} a_1 t^3 + a_2 t^2 + a_3 t + a_4 = \theta(t;1) = 0, \\ a_1(t+h)^3 + a_2(t+h)^2 + a_3(t+h) + a_4 = \theta(t+h;1), \\ 3a_1 t^2 + 2a_2 t + a_3 = \dot{\theta}(t;1), \\ 3a_1(t+h)^2 + 2a_2(t+h) + a_3 = \dot{\theta}(t+h;1) \end{cases}$$

to obtain

$$\int_t^{t+h} L_3(\tau) d\tau = \left(\frac{1}{4} a_1 \tau^4 + \frac{1}{3} a_2 \tau^3 + \frac{1}{2} a_3 \tau^2 + a_4 \tau \right) \Big|_t^{t+h} =$$

$$= \frac{h}{12} (6\theta(t+h;1) - h\dot{\theta}(t+h;1)),$$

$$\int_t^{t+h} \theta(\tau;1) d\tau = \frac{h}{12} [6\theta(t+h;1) - h\dot{\theta}(t+h;1)] + O(h^5),$$

$$\begin{aligned} x(t+h) = x(t) + \frac{h}{12} \{ & 6f(x(t), t) + \\ & + 6f(p(t+h), t+h) - h[\dot{f}(p(t+h), t+h) - \\ & - x''(t) + f'_x(p(t+h), t+h) \times \\ & \times [2f(x(t), t) - f(p(t+h), t+h) + 2hx''(t)]] \}. \end{aligned} \quad (2)$$

To simplify the calculation of the values of the function f at the points $(x(t_{k-1}+h), t_{k-1}+h)$ we implement the formula

$$f(x(t_{k-1}+h), t_{k-1}+h) = f(p(t_{k-1}+h), t_{k-1}+h) + f'_x(p(t_{k-1}+h), t_{k-1}+h)[x(t_{k-1}+h) - p(t_{k-1}+h)]. \quad (3)$$

Here are results of calculation for oscillating systems

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = -10x_2(t) / (t-10)^2, & x_1(0) = 0, \\ \dot{x}_2(t) = 10x_1(t) / (t-10)^2, & x_2(0) = 1 \end{cases}$$

with integration step $h = 0.1$.

Table 1

Absolute coordinate deviations from the analytical approximate solutions.

t	Runge-Kutta 4 th order accuracy method	Iteration formula (2)	Iteration formula (2) with regard (3)	Iteration formula (1)
0.1	2.41E-11 3.15E-14	3.54E-11 1.00E-13	3.54E-11 1.00E-13	8.38E-07 1.02E-06
0.5	1.74E-10 9.87E-13	2.06E-10 8.00E-12	2.06E-10 8.00E-12	9.17E-07 1.28E-06
3.0	2.17E-09 1.01E-09	4.15E-09 1.80E-09	4.15E-09 1.80E-09	1.74E-07 6.24E-06
7.0	8.67E-07 9.44E-07	1.06E-06 1.32E-06	1.06E-06 1.32E-06	2.29E-04 2.94E-04
8.5	1.69E-04 2.61E-04	2.25E-04 3.05E-04	2.25E-04 3.05E-04	2.81E-03 1.34E-02
9.0	3.82E-03 8.98E-03	4.87E-03 1.01E-02	4.87E-03 1.01E-02	1.95E-02 1.15E-01

From the approximation

$$\begin{aligned} x(\tau) = x(t) + (\tau-t)x'(t) + \frac{(\tau-t)^2}{2!} x''(t) + \\ + \frac{(\tau-t)^3}{3!} x'''(t) + O(h^4), \quad \tau \in [t, t+2h], \\ x'''(t) = (x''(t+h) - x''(t)) / h + O(h) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p(\tau) = x(t) + (\tau-t)x'(t) + \\ + \frac{(\tau-t)^2}{2} \left[1 - \frac{\tau-t}{3h} \right] x''(t) + \frac{(\tau-t)^3}{6h} x''(t+h), \end{aligned}$$

approximates x with the error value of $O(h^4)$. Thus with $m = 2$ and

it follows that on the interval $[t, t+2h]$ the function

$$p(t+2h) = x(t) + 2hf(x(t), t) + \frac{2}{3}h^2x''(t) + \frac{4}{3}h^2x''(t+h) \quad (4)$$

we have

$$x(t+2h) = p(t+2h) + \int_t^{t+2h} \theta(\tau; 2) d\tau.$$

The approximated value of $\int_t^{t+2h} \theta(\tau; 2) d\tau$ may be calculated by

$$\int_t^{t+2h} L_4(\tau) d\tau = \frac{h}{15} (16\theta(t+h; 2) + 7\theta(t+2h; 2) - h\dot{\theta}(t+2h; 2)),$$

giving

$$\int_t^{t+2h} L_4(\tau) d\tau = \left(\frac{1}{5}a_1\tau^5 + \frac{1}{4}a_2\tau^4 + \frac{1}{3}a_3\tau^3 + \frac{1}{2}a_4\tau^2 + a_5\tau \right) \Big|_t^{t+2h} \left\{ \begin{array}{l} a_1t^4 + a_2t^3 + a_3t^2 + a_4t + a_5 = \theta(t; 2) = 0, \\ a_1(t+h)^4 + a_2(t+h)^3 + a_3(t+h)^2 + a_4(t+h) + a_5 = \theta(t+h; 2), \\ a_1(t+2h)^4 + a_2(t+2h)^3 + a_3(t+2h)^2 + a_4(t+2h) + a_5 = \theta(t+2h; 2), \\ 4a_1t^3 + 3a_2t^2 + 2a_3t + a_4 = \dot{\theta}(t; 2) = 0, \\ 4a_1(t+2h)^3 + 3a_2(t+2h)^2 + 2a_3(t+2h) + a_4 = \dot{\theta}(t+2h; 2). \end{array} \right.$$

From the formula

$$\int_a^b \varphi(\tau) d\tau = \frac{b-a}{90} \left(12\varphi\left(\frac{a+b}{2}\right) + 32\left(\varphi\left(\frac{3a+b}{4}\right) + \varphi\left(\frac{a+3b}{4}\right) + 7(\varphi(a) + \varphi(b))\right) \right) - \frac{1}{1935360} (b-a)^7 \varphi^{(6)}(\zeta), \quad \zeta \in [a, b],$$

it follows

$$\int_t^{t+2h} \theta(\tau; 2) d\tau = O(h^7) + \frac{h}{15} [16\theta(t+2h; 2) + 7\theta(t+2h; 2) - h\dot{\theta}(t+2h; 2)].$$

giving the high order simulators

$$f(p(t_{k-1}+h), t_{k-1}+h) = f(x(t_{k-1}+h), t_{k-1}+h) + f'_x(x(t_{k-1}+h), t_{k-1}+h)[p(t_{k-1}+h) - x(t_{k-1}+h)], \quad (5)$$

$$f(x(t_{k-1}+2h), t_{k-1}+2h) = f(p(t_{k-1}+2h), t_{k-1}+2h) + f'_x(p(t_{k-1}+2h), t_{k-1}+2h)[x(t_{k-1}+2h) - p(t_{k-1}+2h)], \quad (6)$$

$$x(t+2h) = p(t+2h) + \frac{h}{12} \{ -23f(x(t), t) + 16f(p(t+h), t+h) + 7f(p(t+2h), t+2h) + h[-9x''(t) - 20x''(t+h) - \dot{f}(p(t+2h), t+2h)] + (7) + hf'_x(p(t+2h), t+2h)[-18f(x(t), t) + 16f(p(t+h), t+h) + f(p(t+2h), t+2h) - h(8x''(t) + 12x''(t+h))] \},$$

on the intervals $t \in [t_i, t_{i+1}]$.

Table 2

Absolute coordinate deviations from the analytical approximate solutions.

t	Iteration formula (7)	Iteration formula (7) with regard (5), (6)	Iteration formula (4)
0.2	2.75E-12	2.75E-12	1.00E-10
	2.80E-12	2.80E-12	1.03E-09
0.5	6.93E-12	6.93E-12	1.00E-10
	6.50E-12	6.50E-12	1.27E-09
3.0	3.52E-10	3.52E-10	7.55E-09
	1.02E-10	1.02E-10	7.38E-09
7.0	2.14E-07	2.14E-07	2.52E-06
	5.11E-07	5.11E-07	4.48E-06
8.5	2.29E-04	2.29E-04	1.09E-03
	3.14E-04	3.14E-04	3.74E-04
9.0	7.89E-03	7.89E-03	3.14E-02
	1.98E-02	1.98E-02	3.30E-03

Conclusion

The proposed numerical algorithms based on methods of solve operators, enable to raise to high

precision of the numerical simulators by implementation of high order asymptotic solve operators.

Список використаних джерел

1. Бейко І.В. Методи високих порядків для розв'язування задач Коші та багатомірних крайових задач за допомогою асимптотично-розв'язуючих операторів / І.В. Бейко, П.М. Зінко // Математичне та комп'ютерне моделювання, Кам'янець-Подільський національний університет, Інститут кібернетики імені В.М.Глушкова НАН України, – Кам'янець-Подільський: К-ПНУ, 2009. –Вип.1. – С.18-25.
2. Бейко І.В. Задачі, методи і алгоритми оптимізації: Навчальний посібник / І.В. Бейко, П.М. Зінко, О.Г. Наконечний –К.: «Київський університет», 2012. – 799 с.
3. Ermoliev Yu.M. Stochastic quasi-gradient methods and their application to systems optimization / Yu.M. Ermoliev. Stochastics 4, 1983. –pp.1-37.
4. Бейко І.В. Розвиток методів розв'язуючих та асимптотично-розв'язуючих операторів для побудови оптимальних та асимптотично-оптимальних математичних моделей / І.В. Бейко // Вісник Київського університету. Серія: Кібернетика. – 2002. – Вип.3. –С. 10-15.

References

1. Beyko I.V., Zinko P.M. High order methods for solving Cauchy problems and multidimensional boundary value problems by implementation of solve operators // Mathematical and computer modeling, Kamenetz-Podolsk National University, Glushkov Institute of Cybernetics of National Academy of Sciences of Ukraine –Kamenetz-Podolsk, 2009. – V.1. –pp. 18-25.
2. Beyko I.V., Zinko P.M., Nakonechniy O.G. Optimization problems, methods, and algorithms: Manual. –K.: "Kyiv University", 2012.
3. Ermoliev Yu.M. Stochastic quasi-gradient methods and their application to systems optimization, Stochastics 4, 1983. –pp.1-37.
4. Beyko I.V. Development of methods of solving and asymptotic-solving operators to design optimal and asymptotic-optimal mathematical models // Bulletin of the University of Kiev. Series: Science, 2002. – V.3. –pp. 10-15.

Надійшла до редколегії 04.12.14

УДК 627.324.2/3:532.72

Власюк А.П.¹, д.т.н., проф.,
Цветкова Т.П.², ст. викл.

**Математичне моделювання
масоперенесення солей при
нестационарній фільтрації і
вологперенесенні в насичено-
ненасиченому ґрунтовому масиві**

¹Міжнародний економіко-гуманітарний
університет імені акад. С. Дем'янчука, 33027,
м. Рівне, вул. Степана Дем'янчука, 4,
e-mail: A.P.Vlasyuk.rv@gmail.com

²Національний університет водного
господарства та природокористування, 33000,
м. Рівне, вул. Соборна, 11,
e-mail: Tsvetkova@ukr.net

A.P. Vlasyuk¹, Doctor of science, prof.,
T.P. Tsvetkova², senior teacher

**Mathematical modelling of salts mass
transfer under non-stationary filtration
and moisture transfer in saturated non-
saturated soil mass**

¹International university of economics and
humanities named after academician Stepan
Demyanchuk, 33027, Rivne, Stepan Demyanchuk
st, 4,
e-mail: A.P.Vlasyuk.rv@gmail.com

²National University of Water Management
National Resources Use, 33000 Rivne, Soborna st,
11, e-mail: Tsvetkova@ukr.net

Проведено математичне моделювання процесу масоперенесення солей з врахуванням нестационарної фільтрації та вологперенесення в насичено-ненасиченому ґрунті у двовимірному нелінійному випадку. Чисельний розв'язок відповідної крайової задачі знайдено методом скінченних різниць. В результаті програмної реалізації задачі проведені чисельні експерименти і здійснено їх аналіз.

Ключові слова: масоперенесення, вологперенесення, нестационарна фільтрація, повне і неповне насичення, концентрація, напір.

The mathematical modelling was carried out of the process of mass transfer of salts taking into account non-stationary filtration and moisture transfer in saturated-non-saturated soil with two-dimensional non-linear case. On the basis of the built mathematical model of this boundary problem the research has been conducted of the process of salt transfer to the drain in the area of complete saturation and of the process of moisture transfer taking into account salt transfer in the area of incomplete soil saturation. The comprehensive study is carried out of the process of salt transfer in areas of complete and incomplete saturation. For this purpose these areas of water saturation are considered as one entity with common unknown boundary which is in the process of problem solution. This gave the possibility to find the interconnection between investigated processes and to carry out their forecast in the area of saturated-non-saturated soil medium. Numeric solution of corresponding boundary problem were found by the method of finite differences. As the result of the programme implementation of the problem numeric experiments were carried out and their analysis was conducted.

Key Words: mass transfer, moisture transfer, non-stationary filtration, complete and incomplete saturation, concentration, head.

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

Вступ. Підтоплення територій населених пунктів та інших земельних ділянок відбувається унаслідок підйому рівня ґрунтових вод (РГВ). Основні способи боротьби з підтопленнями та негативним впливом ґрунтових вод базуються на будівництві різного типу дренажних систем. Вибір оптимальних заходів повинен розглядатися

на основі прогнозу протікання даних процесів та фізико-хімічних показників з врахуванням техногенних і природно-кліматичних чинників. Тому для управління водними ресурсами необхідно детально дослідити процеси, що протікають у ґрунтових масивах, а саме: вологперенесення, що описує динаміку руху

вологи, - в ненасиченому ґрунті, фільтрацію – в насиченому ґрунті, масоперенесення – поширення забруднення та засолення ґрунтів. Процеси фільтрації та масоперенесення в насичених ґрунтах розглянуто в [1-3], теоретичні основи вологоперенесення розглядалися окремо в областях повного і неповного насичення. Крім того, процес вологоперенесення розглядався без врахування масоперенесення та впливу осмотичних явищ. У даній роботі здійснено комплексне дослідження процесу масоперенесення солей при нестационарній фільтрації та вологоперенесенні в насичено-ненасиченому ґрунтовому масиві у нелінійному двовимірному випадку.

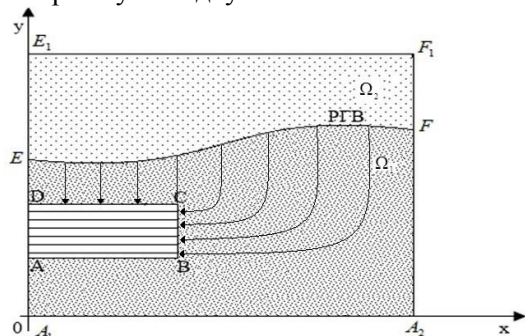


Рис. 1 Фільтрація соляного розчину до горизонтального дренажу

Потрібно дослідити процеси нестационарної фільтрації соляних розчинів до дрени в області повного насичення Ω_1 і вологоперенесення в області неповного насичення Ω_2 з врахуванням перенесення солей в обох областях.

Математична модель задачі. Математична модель процесу масоперенесення при нестационарній фільтрації соляних розчинів в області повного насичення Ω_1 у загальноприйнятих позначеннях описується диференціальними рівняннями вигляду [1-5]

$$\frac{\partial \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial y} \right)}{\partial y} - v_x(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} - v_y(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial y} - \gamma_1(c_1 - C^*) = \sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_1(c_1) \frac{\partial h_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_1(c_1) \frac{\partial h_1}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(v(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(v(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial y} \right) = a \frac{\partial h_1}{\partial t}, \quad (2)$$

$$v_x^1(c_1) = -k_1(c_1, h_1) \frac{\partial h_1}{\partial x} + v_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad (3)$$

$$v_y^1(c_1) = -k_1(c_1, h_1) \frac{\partial h_1}{\partial y} + v_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial y},$$

$$c_1(x, y, 0) = \tilde{C}_0^1(x, y), \quad \frac{\partial c_1}{\partial n} \Big|_{AA_1 \cup A_1A_2 \cup A_2F \cup DE} = 0; \quad (4)$$

$$h_1(x, y, 0) = \tilde{H}_0(x, y), \quad h_1|_{EF} = y, \quad h_1|_{ABCD} = \tilde{H}_1, \quad (5)$$

$$\frac{\partial h_1}{\partial n} \Big|_{AA_1 \cup A_1A_2 \cup A_2F \cup DE} = 0.$$

Процес масоперенесення солей при вологоперенесенні в області неповного насичення ґрунту Ω_2 описується наступною математичною моделлю [1-5]:

$$\frac{\partial \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial y} \right)}{\partial y} - v_x(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} - v_y(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial y} - \gamma_2(c_2 - C^*) = \sigma_2 \frac{\partial c_2}{\partial t}, \quad (6)$$

$$\mu(h_2) \frac{\partial h_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(c_2, h_2) \frac{\partial h_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(c_2, h_2) \frac{\partial h_2}{\partial y} \right), \quad (7)$$

$$v_x^2(c_2) = -k_2(c_2, h_2) \frac{\partial h_2}{\partial x} + v_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x}, \quad (8)$$

$$v_y^2(c_2) = -k_2(c_2, h_2) \frac{\partial h_2}{\partial y} + v_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial y},$$

$$c_2(x, y, 0) = \tilde{C}_0^2(x, y), \quad (9)$$

$$c_2|_{E_1F_1} = \tilde{C}_2, \quad \frac{\partial c_2}{\partial x} \Big|_{EE_1 \cup F_1F} = 0,$$

$$h_2(x, y, 0) = \tilde{H}_0^2(x, y), \quad h_2|_{EF} = y, \quad \frac{\partial h_2}{\partial n} \Big|_{EE_1 \cup F_1F} = 0. \quad (10)$$

На межі областей повного і неповного насичення (вільній поверхні) EF задані умови спряження для напорів, концентрації соляних розчинів і потоків солі відповідно:

$$h_1|_{EF} = h_2|_{EF}, \quad c_1|_{EF} = c_2|_{EF}, \quad (11)$$

$$[q] = 0 \text{ або } v_1c_1 - D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial n} = v_2c_2 - D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial n}.$$

На дрени $ABCD$ задані наступні граничні умови:

$$\frac{\partial c_1}{\partial n} \Big|_{ABCD} = 0 \text{ або } \frac{\partial c_1}{\partial y} \Big|_{AB \cup CD} = 0, \quad \frac{\partial c_1}{\partial x} \Big|_{CB} = 0.$$

Чисельний метод розв'язування задачі. Для знаходження чисельного розв'язку поставленої крайової задачі використано метод скінченних різниць [6].

Для знаходження чисельного розв'язку задачі нестационарної фільтрації модифікуємо локально-одновимірну схему (ЛОС) О.А.

Самарського [6] на випадок нелінійної крайової задачі.

$$\frac{\partial^2 h_1}{\partial x^2} - \frac{\nu(c_1)}{k_1(c_1)} \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} = \frac{0,5a}{k_1(c_1)} \frac{\partial h_1}{\partial t}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2 h_1}{\partial y^2} - \frac{\nu(c_1)}{k_1(c_1)} \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2} = \frac{0,5a}{k_1(c_1)} \frac{\partial h_1}{\partial t}. \quad (13)$$

Для (12), (13) побудовано неявну різницеву схему, чисельний розв'язок якої знайдено методом прогонки.

$$\frac{H_{1i,j}^{k+\frac{1}{2}} - 2H_{1i,j}^{k+\frac{1}{2}} + H_{1i,j}^{k+\frac{1}{2}}}{h_1^2} - \frac{\nu(c_1)}{k_1(c_1)} \frac{C_{1i,j}^{k+\frac{1}{2}} - 2C_{1i,j}^{k+\frac{1}{2}} + C_{1i,j}^{k+\frac{1}{2}}}{h_1^2} = \frac{0,5a}{k_1(c_1)} \frac{H_{1i,j}^{k+\frac{1}{2}} - H_{1i,j}^k}{0,5\tau}, \quad (14)$$

$$H_{1i,j}^0 = \tilde{H}_0^1, \quad H_{1,0,j}^{k+\frac{1}{2}} = H_{1,1,j}^k, \quad H_{1,n,j}^{k+\frac{1}{2}} = H_{1,n-1,j}^1, \\ i = \overline{1, n-1}, j = \overline{1, m-1}, k = \overline{0, K-1};$$

$$\frac{H_{1i,j-1}^{k+1} - 2H_{1i,j}^{k+1} + H_{1i,j+1}^{k+1}}{h_1^2} - \frac{\nu(c_1)}{k_1(c_1)} \frac{C_{1i,j-1}^{k+1} - 2C_{1i,j}^{k+1} + C_{1i,j+1}^{k+1}}{h_1^2} = \frac{0,5a}{k_1(c_1)} \frac{H_{1i,j}^{k+1} - H_{1i,j}^{k+\frac{1}{2}}}{0,5\tau}, \quad (15)$$

$$H_{1i,j}^0 = \tilde{H}_0^1, \quad H_{1i,0}^{k+1} = H_{1i,1}^k, \quad H_{1i,m}^{k+1} = H_{1i,m-1}^1, \\ i = \overline{1, n-1}, j = \overline{1, m-1}, k = \overline{0, K-1}.$$

Для знаходження розв'язку задачі (1), (3), (5) при повному насиченні модифікуємо ЛОС [6] на випадок нелінійної крайової задачі

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{\nu_x(c_1)}{D_1(c_1)} \frac{\partial c_1}{\partial x} - \frac{0,5\gamma_1}{D_1(c_1)} (c_1 - C^*) = 0,5\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t}, \quad (16)$$

$$\nu_x(c_1) = -k(c_1, h_1) \frac{\partial h}{\partial x} + \nu(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x}; \quad (17)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - \frac{\nu_y(c_1)}{D_1(c_1)} \frac{\partial c_1}{\partial y} - \frac{0,5\gamma_1}{D_1(c_1)} (c_1 - C^*) = 0,5\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t}, \quad (18)$$

$$\nu_y(c_1) = -k(c_1, h_1) \frac{\partial h}{\partial y} + \nu(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial y} \quad (19)$$

при відповідних крайових умовах, заданих на межі області повного насичення.

Розв'язок відповідних крайових задач (18), (20) знайдено з використанням монотонної різницевої схеми та методу прогонки у вигляді

$$C_{1i,j}^{k+\frac{1}{2}} = \alpha_{1i+1,j} C_{1i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} + \beta_{1i+1,j}, \quad (20)$$

$$\alpha_{1i+1,j}^1 = \frac{b_3}{c_3 - \alpha_{1i,j}^1 a_3}, \quad \beta_{1i+1,j}^1 = \frac{a_3 \beta_{1i,j}^1 + f_3}{c_3 - \alpha_{1i,j}^1 a_3},$$

$$\alpha_{1,0,i} = 0, \quad \beta_{1,0,j} = C_{1,0,j}^{k+\frac{1}{2}}, \quad a_3 = \frac{\mu_1}{h_1^2} - \frac{r_{1-}^2}{h_1},$$

$$b_3 = \frac{\mu_1}{h_1^2} + \frac{r_{1+}^2}{h_1}, \quad f_3 = \frac{\sigma_1}{D(c_1)\tau} C_{1i,j}^k - \frac{0,5\gamma_1}{D(c_1)} C_{1i,j}^*,$$

$$i = \overline{1, n-1}, j = \overline{1, m-1}, k = \overline{0, K-1}.$$

$$C_{1i,j}^{k+1} = \alpha_{i,j+1} C_{1i,j+1}^{k+1} + \beta_{i,j+1}, \quad (21)$$

$$\text{де } \alpha_{i,j+1} = \frac{b_4}{c_4 - \alpha_{i,j} a_4}, \quad \beta_{i,j+1} = \frac{a_4 \beta_{i,j} + f_4}{c_4 - \alpha_{i,j} a_4},$$

$$\alpha_{i,0} = 0, \quad \beta_{i,0} = C_{1i,0}^{k+1}, \quad a_4 = \frac{\mu_2}{h_2^2} - \frac{r_{1-}^2}{h_1}, \quad b_4 = \frac{\mu_2}{h_2^2} + \frac{r_{1+}^2}{h_1},$$

$$c_4 = -\frac{2\mu_2}{h_2^2} - \frac{r_{1+}^2}{h_1} + \frac{r_{1-}^2}{h_1} - \frac{0,5\gamma_1}{D(c_1)} - \frac{\sigma_1}{D(c_1)\tau},$$

$$f_4 = \frac{\sigma_1}{D_1(c_1)\tau} C_{1i,j}^{k+\frac{1}{2}} - \frac{0,5\gamma_1}{D_1(c_1)} C_{1i,j}^*,$$

$$i = \overline{1, n-1}, j = \overline{1, m-1}, k = \overline{0, K-1}.$$

Побудову чисельного алгоритму знаходження розв'язку задачі масоперенесення солей з врахуванням вологоперенесення (6)-(10) в області неповного насичення ґрунту здійснено аналогічно попередній задачі з використанням ЛОС [6]. Рівняння вологоперенесення представимо у вигляді двох одновимірних рівнянь:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial^2 x} = 0,5 \frac{\mu(h_2)}{k(c_2, h_2)} \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (22)$$

$$\frac{\partial^2 h}{\partial^2 y} = 0,5 \frac{\mu(h_2)}{k(c_2, h_2)} \frac{\partial h}{\partial t}. \quad (23)$$

Для знаходження розв'язку задач (22), (23) застосовано неявну різницеву схему та метод прогонки. В результаті чого знайдено розв'язок (22) у наступному вигляді:

$$H_{2i,j}^{k+1/2} = \alpha_{i+1,j} H_{2i+1,j}^{k+1/2} + \beta_{i+1,j}, \quad (24)$$

$$\text{де } \alpha_{i+1,j} = \frac{b_5}{c_5 - \alpha_{i,j} a_5}, \quad \beta_{i+1,j} = \frac{a_5 \beta_{i,j} + f_5}{c_5 - \alpha_{i,j} a_5}, \quad \alpha_{i,j} = 0$$

$$\beta_{i,j} = H_{0,j}^{k+1/2}, \quad i = \overline{1, n-1}, j = \overline{1, m-1}, k = \overline{0, K-1}.$$

Загальний розв'язок задачі вологоперенесення для (23) знаходимо у вигляді

$$H_{2i,j}^{k+1} = \alpha_{i,j+1} H_{2i,j+1}^{k+1} + \beta_{i,j+1}, \quad (25)$$

$$\text{де } \alpha_{i,j+1} = \frac{b_6}{c_6 - \alpha_{i,j} a_6}, \quad \beta_{i,j+1} = \frac{a_6 \beta_{i,j} + f_6}{c_6 - \alpha_{i,j} a_6}, \quad \alpha_{0,i} = 0,$$

$$\beta_{i,0} = H_{2,i,0}^{k+1}, \quad i = \overline{1, n-1}, j = \overline{1, m-1}, k = \overline{0, K-1}.$$

В результаті знаходження розв'язку задачі вологоперенесення, знайдено розв'язок задачі масоперенесення солей в даній області водонасичення. Для цього модифікуємо ЛОС для задачі масоперенесення солей при вологоперенесенні (6), (8), (10).

$$\frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} - \frac{v_x(c_2)}{D_2(c_2)} \frac{\partial c_2}{\partial x} - \frac{0,5\gamma_2}{D_2(c_2)} (c_2 - C^*) = 0,5\sigma_2 \frac{\partial c_2}{\partial t}, \quad (26)$$

$$v_x(c_2) = -k(c_2, h_2) \frac{\partial h_2}{\partial x} + v_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x}; \quad (27)$$

$$\frac{\partial^2 c_2}{\partial y^2} - \frac{v_y(c_2)}{D_2(c_2)} \frac{\partial c_2}{\partial y} - \frac{0,5\gamma_2}{D_2(c_2)} (c_2 - C^*) = 0,5\sigma_2 \frac{\partial c_2}{\partial t}, \quad (28)$$

$$v_y(c_2) = -k(c_2, h_2) \frac{\partial h_2}{\partial y} + v_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial y}. \quad (29)$$

при відповідних крайових умовах, заданих на межі області неповного насичення.

Чисельний розв'язок задач (26)-(29) знайдено з використанням монотонної різницевої схеми аналогічно розв'язуванню задач (16), (18) в області повного насичення.

Компоненти швидкості фільтрації знаходимо в результаті апроксимації рівнянь (17), (19), (27), (29). Алгоритм розрахунку вузлів вільної поверхні EF побудовано на основі роботи [2], що дає можливість отримати розв'язок задачі в обох підобластях насичено-ненасиченої області.

Програмна реалізація та результати чисельних експериментів. Програмна реалізація і чисельні експерименти проводилися в середовищі візуально-подійного, об'єктно-орієнтованого програмування Microsoft Visual Studio 2012 на мові C# при сталих початкових і граничних умовах з такими вихідними даними:

$$T = 360 \text{ діб}, \quad l_1 = 10 \text{ м}, \quad l_2 = 5 \text{ м}, \quad \sigma_1 = \sigma_2 = 0,4,$$

$$H_1 = 5 \text{ м}, \quad H_2 = 0,3 \text{ м}, \quad \gamma_1 = \gamma_2 = 0,0065,$$

$$C^* = 350 \text{ г/літр}, \quad \tilde{C}_1 = 10 \text{ г/літр}, \quad \tilde{C}_2 = 40 \text{ г/літр},$$

$$k(c) = 0.0002c^6 - 0.00088c^5 + 0.162c^4 - 1.3194c^3 + 3.9229c^2 + 0.0223c + 18.187,$$

$c \in [0;1]$ - безрозмірна величина [4].

В результаті програмної реалізації побудованого обчислювального алгоритму розв'язування задачі нестационарної фільтрації та вологоперенесення у відповідних областях отримали поле розподілу напорів рідини в насичено-ненасиченому ґрунтовому масиві (рис. 2).

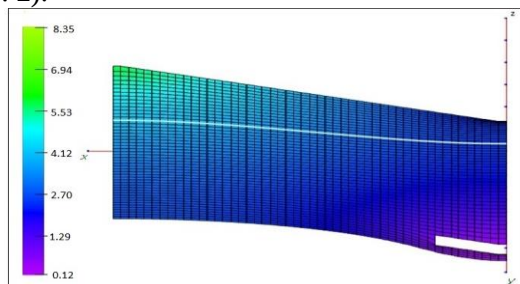


Рис. 2 Розподіл поля напорів рідини в насичено-ненасиченому ґрунтовому масиві

Результат сумісного розв'язування задачі масоперенесення солей в областях повного і неповного насичення зображено на рис. 3.

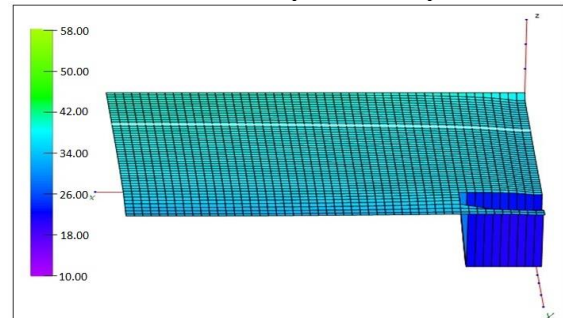


Рис. 3 Графік розподілу концентрації сольових розчинів в області насичено-ненасиченого ґрунту

В якості чисельного експерименту для встановлення впливу нестационарної фільтрації на процес масоперенесення солей знайдено розв'язок задачі стаціонарної фільтрації. Порівняльні графіки розподілу напорів рідини та концентрації солей мають вигляд (рис. 5, 6)

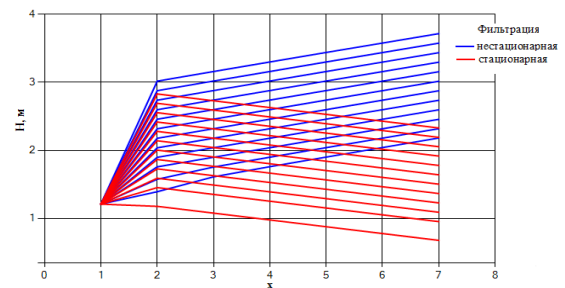


Рис. 5 Графік порівняння розподілу п'єзометричних напорів для задач нестационарної та стаціонарної фільтрації

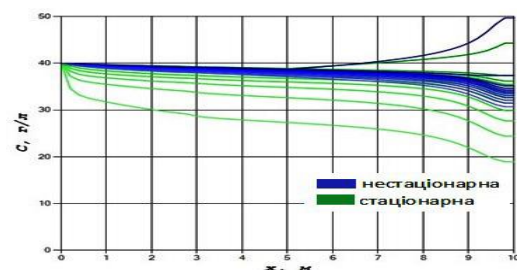


Рис. 6 Графік порівняння розподілу концентрації солей при нестационарній та стаціонарній фільтрації

На основі отриманих результатів програмної реалізації та чисельних експериментів встановлено наступне: в області насичено-ненасиченого ґрунтового середовища розподіл напорів рідини спадає з часом та глибиною (рис. 2); розподіл концентрації солей монотонно спадає з часом та глибиною під дією процесу фільтрації та вимивання сольових розчинів

через дренаж (рис. 3). Під дією фільтраційних процесів вільна поверхня рухається вниз і її положення змінилося на 40% (рис. 4), що потрібно враховувати при використанні дренажних систем в якості елемента осушувальної системи. В результаті порівняння результатів розв'язків задачі фільтрації встановлено збільшення значень напорів рідини (10-20%) та концентрації солей (10%) при нестационарній фільтрації (рис. 5, 6), що слід враховувати при математичному моделюванні фільтраційних процесів.

6. Висновки. В роботі проведено математичне моделювання процесу масоперенесення солей при нестационарній фільтрації та вологоперенесенні в насичено-ненасиченому

грунтовому середовищі в двовимірному нелінійному випадку. Чисельний розв'язок задачі знайдено методом скінченних різниць з використанням модифікованої ЛОС на випадок нелінійної крайової задачі. В результаті чого встановлено монотонне спадання концентрації сольових розчинів з глибиною по всій області насичено-ненасиченого ґрунту під дією фільтраційного потоку, що обумовлено вимиванням сольових розчинів з пористого середовища через дренаж. При врахуванні нестационарної фільтрації напори рідини зростають інтенсивніше, що призводить до більш швидкого вимивання сольових розчинів з пористого середовища.

Список використаних джерел

1. Веригин Н.Н. Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах / Н.Н. Веригин, Б.С. Шержуков // Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917 – 1967). – М.: Наука, 1969. – С. 237-313.
2. Сергиенко И.В. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах // И. В.Сергиенко, В.В. Скопецкий. – К.: Наук. думка, 1991. – 432 с.
3. Ляшко И.И. Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах / И.И. Ляшко, Л.И. Демченко, Г.Е. Мистецкий – К.: Наук. думка, 1991. – 262 с.
4. Власюк А.П. Математичне моделювання процесу масопереносу при фільтрації і вологоперенесенні сольових розчинів в областях повного і неповного насичення / А.П. Власюк, Т.П. Цветкова // Вісник Київськ. ун-ту. Серія: Фіз.-мат. науки. – 2012. – Вип. 1. – С. 137-144.
5. Власюк А.П. Математичне моделювання процесу солепереносу при фільтрації та вологопереносі в насичено-ненасиченому ґрунтовому масиві при наявності рухомої вільної поверхні / А.П. Власюк, Т.П. Цветкова // Наук. жур. Вісник Тернопільського нац. техн. ун-ту. – 2014. - №2 (74). – С. 219-233.
6. Самарский А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.

References

1. VERIGIN, N.N. and SHERZHUKOV B.S. (1969) "Diffusion and mass exchange during filtration of liquids in porous media", *Razvitie issledovaniy po teorii filtratsii v SSSR (1917 – 1967)*, Nauka, Moscow, Russia, pp. 237-313.
2. SERGIENKO, I.V., SKOPETSKII, V.V. and DEINEKA, V.S. (1991) *Matematicheskoe modelirovanie i issledovanie protsessov v neodnorodnykh sredah* [Mathematical Modeling and Investigation of Processes in Inhomogeneous Media], Naukova dumka, Kiev, Ukraine
3. LYASHKO, I.I., DEMCHENKO, L.I. and MISTETSKII G. E. (1991) *Chislennoe reshenie zadach teplo- i massoperenosa v poristyykh sredah* [Numerical Solution of Problems of Heat and Mass Transfer in Porous Media], Naukova dumka, 1991, Kiev, Ukraine
4. VLASYUK, A.P. and TSVETKOVA, T.P. (2012) "Mathematical model of the mass transfer during the filtration and the moisture transfer of salt solutions in full and partial saturation soils", *Visnyk KNU imeni T. Shevchenka, Seriya: fizyko-matematychni nauky*, vol 1, pp. 137-144.
5. VLASYUK, A.P. and TSVETKOVA, T.P. (2014) "Mathematical modelling of process of salt transfer under filtration and moisture transfer in saturated and non-saturated soil mass with available mobile free surface", *Visnyk Ternopil's'koho natsional'noho tekhnichnoho universytetu*, vol. 2 (74), pp. 219-233.
6. SAMARSKII, A.A. (1989) *Teoriya raznostnykh skhem* [Theory of Difference Schemes], Nauka, Moscow, Russia

Надійшла до редколегії 18.09.15

УДК 519.7

Галкін О. А., к.ф.-м.н., м.н.с.

**Непараметричний метод класифікації
для задач з нееліптичним розподілом
даних на основі глибиннозалежної Σ -
схеми**

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т.
Академіка Глушкова 4д,
e-mail: galkin.o.a@gmail.com

O. A. Galkin, candidate of physical and mathematical
sciences, junior researcher

**Nonparametric classification method for
problems with non-elliptical distribution of
data based on depth dependent Σ -diagram**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: galkin.o.a@gmail.com

Стаття присвячена розробці непараметричного методу класифікації, що не вимагає попередньої інформації про розподіл або форму розділової кривої. Запропоновано новий Σ -класифікатор для розв'язання багатокласових задач класифікації з нееліптичним розподілом даних на основі методу мажоритарного голосування. Реалізовано процедуру використання методу крос-перевірки для вибору ступеня розділового многочлена в алгоритмі реалізації Σ -класифікатора. Досліджено автоматичну технологію визначення форм розділових кривих Σ -класифікатора по геометричній структурі даних, що лежать в основі Σ -схеми.

Ключові слова: Σ -класифікатор, задача класифікації, непараметричний розподіл

The article is devoted to developing nonparametric classification algorithm that does not require prior information about distribution or form of dividing curve. The new Σ -classifier is proposed to solve multiclass classification problems with non-elliptical of distribution data on the basis of majority voting method. The procedure of using the cross-validation method is implemented for selecting the degree of the dividing polynomial in the algorithm of Σ -classifier. This procedure obviously outperforms the linear division when the linear division fails to reach the efficiency of the Bayes classifier. Such approach can also be a more objective approach to select the suitable concept of depth in Σ -classifiers. The automatic technology is studied to determine the form of dividing curves of Σ -classifier by the geometric structure of the data that are the basis of the scheme. The advantage of the proposed method is that there is no need to evaluate parameters such as means and scales, which is often required by the most classification methods. Comparative analysis shows that the Σ -classifier frequently is more effective than the maximum depth classifier, and is comparable with the k -nearest neighbor method. The constructed Σ -classifier is absolutely data operated and its classification result can be reproduced on a two-dimensional diagram despite the dimension of the data.

Key Words: Σ -classifier, classification problem, nonparametric distribution

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

Вступ

Непараметричні класифікатори є досить гнучкими щодо адаптації різних структур даних. Враховуючи актуальність даної проблематики, у даній роботі запропоновано та досліджено новий непараметричний класифікатор на основі глибиннозалежної Σ -схеми, що визначає значення глибини точок двох заданих вибірок відносно двох відповідних розподілів, а також

трансформує вибірки довільної розмірності в двовимірну діаграму розсіювання. Ідея запропонованого Σ -класифікатора полягає в отриманні кривої, що найбільш ефективно розділяє дві вибірки в Σ -схемі таким чином, що розділення забезпечує мінімальний коефіцієнт помилкової класифікації в заданій Σ -схемі. Виходячи з цього, розглядається Σ -схема, де

$\{Z_1, \dots, Z_n\} (\equiv Z)$ та $\{X_1, \dots, X_m\} (\equiv X)$ є двома випадковими вибірками, відповідно з розподілів H та U , що є визначеними на R^r . Отже, Σ -схема визначається як

$$\Sigma(H, U) = \{(E_H(z), E_U(z)), z \in Z \cup X\}, \quad (1)$$

де $E(\cdot)$ означає $\forall$ дійсне поняття глибини. Зазначимо, що Σ -схема є завжди двовимірним графіком, незалежно від розмірів вибірки та визначається як

$$\Sigma(H_n, U_m) = \{(E_{H_n}(z), E_{U_m}(z)), z \in Z \cup X\}, \quad (2)$$

якщо H та U є невідомими. Далі буде показано, що Σ -схеми можуть виявляти певні відмінності між двома множинами даних, на основі яких може бути побудований новий класифікатор.

Дана стаття охоплює лише двокласові задачі, хоча запропонований метод класифікації може бути застосований до багатокласових задач з використанням методу мажоритарного голосування [1].

Нехай $\{Z_1, \dots, Z_n\} (\equiv Z)$ та $\{X_1, \dots, X_m\} (\equiv X)$ є двома випадковими вибірками, відповідно з розподілів H та U , що є визначеними на R^r . Якщо $H=U$, тоді Σ -схема повинна бути зосереджена вздовж прямої в 45 градусів, як слідує з визначення Σ -схеми в (2). Зазначимо, що Σ -схема матиме певне відхилення від прямої в 45 градусів за умови, якщо розподіли H та U є різними.

На рис. 1-2 показано побудову Σ -схеми за допомогою глибини Махаланобіса для двох двовимірних нормальних вибірок розміру 300 з різницею у розташуванні даних. Зазначимо, що вибірка 1 має стандартний двовимірний нормальний розподіл даних, а вибірка 2 – із середнім зміщенням до $(2, 0)'$. На рис. 1 квадрати червоного кольору означають елементи даних з Z , а символи "x" – елементи даних з X , що полегшує ідентифікацію опорних точок однієї вибірки в порівнянні з іншою. Тобто, Σ -схема на рис. 1 демонструє, що елементи даних з двох різних вибірок відображаються симетрично навколо прямої в 45 градусів. Крім того, пряма в 45 градусів є найбільш ефективним способом для розділення двох вибірок в Σ -схемі. У даному випадку правило класифікації розділової прямої в 45 градусів призначитиме z до H , якщо $E_{H_n}(z) > E_{U_m}(z)$ та z до U в іншому випадку.

Отже, найбільш ефективна розділова пряма між двома вибірками в Σ -схемі повинна забезпечувати продуктивність найбільш ефективної розділової прямої між двома вибірками у вихідному просторі R^2 .

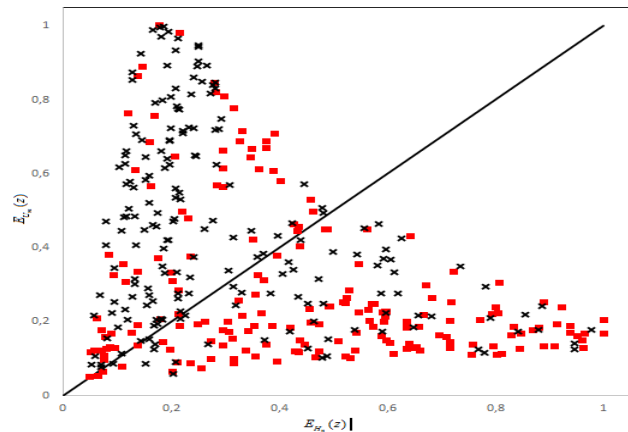


Рис. 1. Експеримент 1-1

Вибірки в їх вихідному просторі R^2 можна побачити на рис.2, де квадрати червоного кольору означають елементи даних з Z , а "x" – елементи даних з X . Обидві криві, що є дуже близькими, отримані таким чином: товста крива – шляхом відображення в Σ -схемі прямої в 45 градусів у простір R^2 , а тонка крива – генерується з правила Байеса [2].

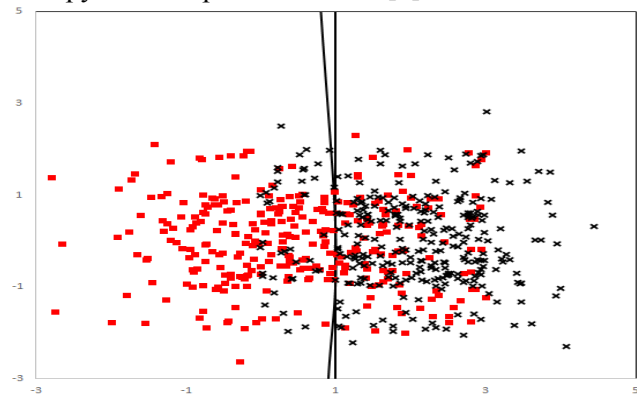


Рис. 2. Експеримент 1-2

Для дослідження відмінностей у масштабі ми множимо всі елементи даних в Z на 3 та розглядаємо нову вибірку Z , що має двовимірний нормальний розподіл із середнім значенням $(0, 0)'$ та коваріаційною матрицею $7\Lambda_2$, де Λ_2 є двовимірною одиничною матрицею.

На рис. 3 представлено Σ -схему X та нову вибірку Z , де обидві двовимірні нормальні вибірки з різницею в розташуванні даних та масштабі з розділенням прямої в Σ -схемі більше не відображаються симетрично. У даному випадку елементи даних з Z розташовані в напрямку осі x , а елементи даних з X – до вертикальної прямої $x=1$. Для цих двох вибірок ми застосовуємо класифікатор максимальної глибини, що еквівалентний побудові прямої в 45 градусів та присвоєнню елементів даних до U та

H , коли вони розташовані вище та нижче прямої, відповідно. Очевидно, що дане правило класифікації призначатиме більшість елементів даних з X в H та забезпечить високий коефіцієнт помилкової класифікації [3]. Таким чином, на основі результатів Σ -схеми можна зробити висновок, чому класифікатор максимальної глибини має низьку продуктивність, коли розподіли мають різні дисперсійні структури [4,5].

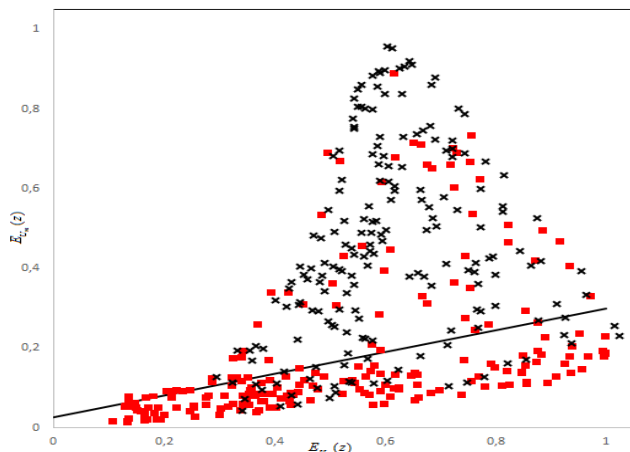


Рис. 3. Експеримент 2-1

З рис. 3 зрозуміло, що існує пряма, яка може ефективно розділити дві вибірки, незважаючи на те, що дві такі вибірки в Σ -схемі більше не мають розкиду в симетричній моделі.

Подальше дослідження показує, що коефіцієнт помилкової класифікації може знизитися, якщо розділова пряма на рис. 3 замінюється відповідним многочленом, як показано на рис. 5.

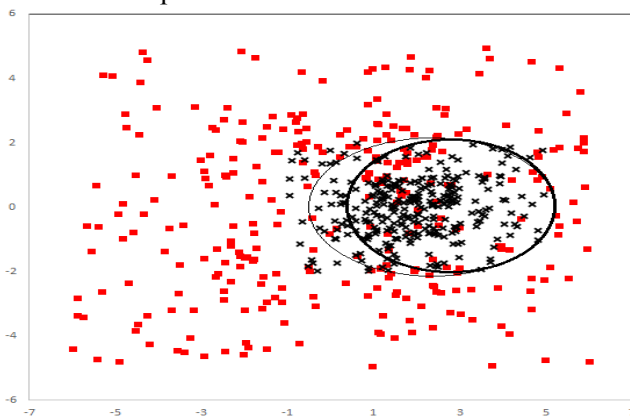


Рис. 4. Експеримент 2-2

Зауважимо, що жирні суцільні кола на рис. 4 та рис. 6, де зображені дві двовимірні нормальні вибірки з різницею в розташуванні та масштабі з поліноміальним розділом даних в Σ -схемі, є розділяючими кривими в початковому

просторі, що відповідають прямій на рис. 3 та многочлену на рис. 5, відповідно.

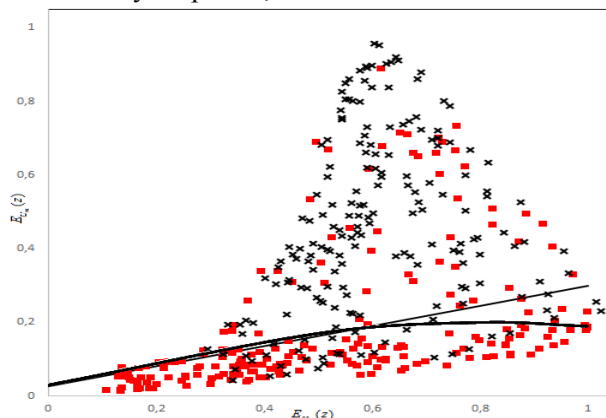


Рис. 5. Експеримент 3-1

Крім того, на рис. 4 найбільше коло є розділовою кривою, отриманою з правила Байеса. Елементи даних з рис. 1-6 припускають, що крива або пряма, що найкраще розділяє дві вибірки в Σ -схемі буде найбільш ефективною розділовою кривою (прямою) між двома вибірками у вихідному просторі.

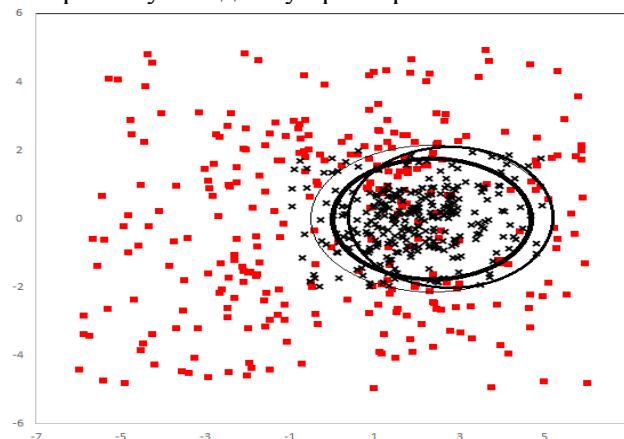


Рис. 6. Експеримент 3-2

Наступна теорема для унімодальних та еліптичних розподілів підтверджує дане явище.

Теорема 1. Нехай $h_1(\cdot)$ та $h_2(\cdot)$ є еліптичними функціями щільності розподілів H та U , відповідно. Також припустимо, що дані функції є такої форми:

$$h_i(z) = v_i |\Xi_i|^{-1/2} f_i((z - \varepsilon_i)' \Xi_i^{-1} (z - \varepsilon_i)), \quad (3)$$

де $i=1,2$, а $f_i(\cdot)$ є строго спадними функціями. Тоді, правило Байеса є еквівалентним такий схемі:

а) якщо $E_U(z) > d(E_H(z))$, то $z \in U$,

б) якщо $E_U(z) < d(E_H(z))$, то $z \in H$,

що має місце зп умови, що E_H та E_U є строго зростаючими функціями від h_1 та h_2 , відповідно, а $d(\cdot)$ є деякою дійсною зростаючою функцією.

Доведення. Очевидно, що $h_1(z) = u_1(E_H(z))$ та $h_2(z) = u_2(E_U(z))$, оскільки E_H та E_U є строго спадними функціями від $h_1(\cdot)$ та $h_2(\cdot)$, відповідно. Тому, правило Байеса може бути виражене таким чином:

$$p_2 h_2(z) / p_1 h_1(z) > 1 \Leftrightarrow E_U(z) > u_2^{-1} \left[\left(\frac{p_1}{p_2} \right) u_1(E_H(z)) \right]$$

та

$$p_2 h_2(z) / p_1 h_1(z) < 1 \Leftrightarrow E_U(z) < u_2^{-1} \left[\left(\frac{p_1}{p_2} \right) u_1(E_H(z)) \right],$$

де $u_i(\cdot)$ є деякими строго зростаючими функціями, що залежать від функцій глибини. Таким чином ми отримуємо результат, беручи

$$d(\cdot) = u_2^{-1} \left[\left(\frac{p_1}{p_2} \right) u_1(\cdot) \right]. \text{ Теорему доведено.}$$

Зазначимо, що в рамках еліптичних розподілів теорема 1 означає, що найбільш ефективна розділова крива між двома вибірками в просторі R^r еквівалентна кривій, що найбільш ефективно розділяє дві вибірки в Σ -схемі. Крім того, оскільки глибина даних характеризує розподіли по центральності, найбільш ефективна розділова функція в Σ -схемі також призведе до побудови досить ефективного класифікатора для нееліптичних розподілів. Однак, дана розділова функція в Σ -схемі може не бути зростаючою для нееліптичних розподілів. Для вирішення даної проблеми, необхідно отримати найбільш ефективну функцію з Σ -схеми з осями для переставлених місцями E_U та E_H , а саме $\Sigma(U, H)$. Така розділова функція забезпечить побудову класифікатора, що відрізняється від того, що отриманий з $\Sigma(H, U)$. В результаті, в якості рекомендованого класифікатора ми можемо вибрати той, що показує нижчий коефіцієнт помилкової класифікації. Зауважимо також, що аналогічну процедуру можна було б повторити зі зміненими E_H та E_U .

Таким чином, далі запропоновано підхід з використанням лише $\Sigma(H, U)$ -схеми, хоча результати класифікації можуть бути значно покращені, якщо розглянути обидві Σ -схеми. Оскільки будь-яка гладка функція може бути ефективно апроксимована за допомогою многочлена відповідного ступеня, ми можемо обмежити себе до многочленів для знаходження

функції $d(\cdot)$, що розділяє дві вибірки в Σ -схемі з мінімальним коефіцієнтом помилкової класифікації [6].

Слід зазначити, що відповідно до правила класифікації, розділовий многочлен повинен проходити через початок координат в Σ -схемі. Щоб переконатися в цьому, розглянемо елементи даних, що відповідають $(0, 0)$ в Σ -схемі. Членство у вибірках цих елементів даних є невідомим, оскільки вони мають нульові значення глибини відносно обох вибірок. Тому, правило класифікації фіксуватиме ці елементи даних на розділову криву, що визначає їх приналежність до будь-якої вибірки. Це також слідує з доведення теореми 1, звідки слідує, що $d(\cdot)$ задовольняє $d(0) = 0$.

Отже, далі розглянемо многочлени виду $d_s(z) = \sum_{i=1}^{\Lambda_0} s_i z^i$ зі ступенем Λ_0 , що є наперед визначеним відомим цілим числом та вектором коефіцієнтів многочлена $s = (s_1, \dots, s_{\Lambda_0}) \in R^{\Lambda_0}$. Це дозволить знайти многочлен, що розділяє дві вибірки в Σ -схемі з мінімальним коефіцієнтом помилкової класифікації.

Для знаходження оптимального s , що мінімізує загальний коефіцієнт помилкової класифікації для наперед заданого Λ_0 , розглянемо такий алгоритм класифікації:

- а) якщо $E_{U_m}(z) > d_s(E_{H_n}(z))$, то $z \in U$,
- б) якщо $E_{U_m}(z) < d_s(E_{H_n}(z))$, то $z \in H$.

Далі позначимо через s_0 оптимальне значення s при умові, якщо воно існує та будемо вважати Σ -класифікатор у якості досліджуваного. Отже, відповідно до $E_{U_m}(z) = d_s(E_{H_n}(z))$ в Σ -схемі, ми можемо побудувати многочлен, призначити елементи даних, що розташовані над кривою до U , призначити елементи даних, що розташовані під кривою до H , а потім розрахувати емпіричний коефіцієнт помилкової класифікації для $\forall$ заданого $s \in R^{\Lambda_0}$, а саме:

$$\bar{\Psi}_M(s) = \frac{p_1}{n} \sum_{i=1}^n \Lambda_{\{E_{U_m}(Z_i) > d_s(E_{H_n}(Z_i))\}} + \frac{p_2}{m} \sum_{i=1}^m \Lambda_{\{E_{U_m}(X_i) < d_s(E_{H_n}(X_i))\}}, \quad (4)$$

де $\Lambda_{\{S\}}$ є характеристичною функцією, яка приймає значення 1, якщо S є істинним та 0 в іншому випадку, а p_i - апіорними ймовірностями двох класів, $M = (n, m)$.

Таким чином, запропонований підхід полягає в оцінці оптимального s_0 по $\bar{\Psi}_M$, що

мінімізує емпіричний коефіцієнт помилкової класифікації $\bar{\Psi}_M(s)$ в (4). Отже, якщо $\bar{s}_M = \arg \min\{\bar{\Psi}_M(s)\}$, Σ -класифікатор матиме таку структуру:

- а) якщо $E_{U_m}(z) > d_{\bar{s}_M}(E_{H_n}(z))$, то $z \in U$,
та
б) якщо $E_{U_m}(z) < d_{\bar{s}_M}(E_{H_n}(z))$, то $z \in H$.

Застосовуючи даний алгоритм до множини даних на рис. 2 та виконавши дії по реалізації Σ -класифікатора, ми отримуємо розділовий многочлен другого ступеня, що мінімізує загальний емпіричний коефіцієнт помилкової класифікації.

Алгоритм реалізації Σ -класифікатора

Крок 1. Для проведення мінімізації $\bar{\Psi}_M(s)$ зазначимо, що Σ -класифікатор вимагає знаходження ступеня многочлена Δ_0 , що мінімізує емпіричний коефіцієнт помилкової класифікації $\bar{\Psi}_M(s)$ в (4). У загальному випадку пошук такого многочлена необхідно проводити по всіх многочленах Δ_0 ступеня, що проходять через початок координат. Однак, в лінійному випадку, тобто коли $\Delta_0 = 1$, розглядаються лише такі криві, що проходять через початок координат та на щонайменше одній з $n + m$ точок вибірки, оскільки всі прямі, що проходять між двома сусідніми прямими без опорних точок будуть показувати однаковий коефіцієнт помилкової класифікації. Таким чином, необхідно розглянути щонайбільше $n + m$ прямих, де найбільш ефективною розділовою прямою є та, що забезпечує мінімальний коефіцієнт помилкової класифікації. Зазначимо, що якщо є множина таких прямих, необхідно вибрати пряму з найменшим нахилом.

Те ж саме має місце для випадку, коли $\Delta_0 > 1$. Тобто, необхідно розглянути всі многочлени, що проходять через початок координат та Δ_0 з $n + m$ точок вибірки. Остаточним розділовим многочленом є такий, що забезпечує мінімальний коефіцієнт помилкової класифікації.

Зауважимо, що коли Δ_0 або $n + m$ є великими, обчислення оптимального многочлена може бути досить складним. Це є наслідком того, що цільова функція $\bar{\Psi}_M(s)$ є сумою багатьох характеристичних функцій, які не є всюди диференційованими. Тому, знаходження мінімуму $\bar{\Psi}_M(s)$ вимагає значних обчислювальних витрат. Для знаходження більш ефективного алгоритму

для досліджуваної задачі мінімізації, ми використовуємо логістичну функцію $1/(1 + e^{-\kappa z})$ для апроксимації характеристичної функції $\Lambda_{\{z>0\}}$ в $\bar{\Psi}_M(s)$. В результаті, мінімум можна знайти за допомогою відповідних чисельних методів на основі похідних. Зауважимо, що коли κ є великим, чисельний метод оптимізації для результуючої цільової функції може бути досить нестабільним. Даний вивід має місце незважаючи на те, що велике κ забезпечує більш ефективне наближення $\Lambda_{\{z>0\}}$. Крім того слід зазначити, що вибір κ також відіграє важливу роль. На підставі чисельних досліджень було встановлено, що результати оптимізації є стабільними, якщо $\kappa \in [100, 400]$, а функція глибини нормалізована з верхньою межею 1. У всіх практичних експериментах було вибрано $\kappa = 200$.

Оскільки функція може мати багато локальних мінімумів, початкове значення для s може вплинути на процедуру оптимізації при використанні чисельних методів для знаходження мінімуму вищевказаного наближення до $\bar{\Psi}_M(s)$. Тому, ми пропонуємо новий алгоритм вибору початкового значення.

Найбільш ефективною оцінкою для оптимального s_0 є вектор коефіцієнтів s для многочлена, що мінімізує $\bar{\Psi}_M(s)$ серед усіх многочленів, які проходять через початок координат та Δ_0 точок вибірки в Σ -схемі. Тому, замість проходження через всі многочлени, ми випадковим чином вибираємо досить велике число многочленів з цієї множини та вибираємо такий многочлен, що мінімізує $\bar{\Psi}_M(s)$ з цієї підмножини многочленів, а потім використовуємо його вектор коефіцієнтів s , як початкове значення для s в алгоритмі чисельної оптимізації.

Крок 2. Для вибору Δ_0 ми припускаємо, що степінь многочлена Δ_0 є відомою. Однак, вибір оптимального Δ_0 є однією з найбільш важливих практичних задач. Як і у випадку поліноміальної регресії, існує відповідне відношення між прогнозованим зсувом та прогнозованою дисперсією у виборі Δ_0 . Дане прогнозування означає прогнозування членства для майбутніх елементів даних на основі виконання Σ -класифікатора. Невелике Δ_0 призведе до невеликої прогнозованої дисперсії, але великого прогнозованого зсуву, а велике Δ_0 - до невеликого прогнозованого зсуву, але великої

прогнозованої дисперсії. Для знаходження рішення даної проблеми необхідно використовувати метод крос-перевірки для вибору Δ_0 .

Крок 3. При виборі відповідної функції глибини варто відзначити, що різні функції глибини відповідають різним характеристикам вихідного розподілу. Тому, якщо різні функції глибини використовуються для побудови Σ -схеми, Σ -класифікатор може демонструвати різну поведінку. При наявності апріорної інформації щодо розподілу, можна використовувати метод крос-перевірки для вибору функції глибини, що забезпечує найбільш низький коефіцієнт помилкової класифікації.

Отже, як показано на рис. 1-6, розділова крива може бути будь-якої форми, залежно від структури даних, коли многочлен відображається у вихідний простір. Даний результат має місце

незалежно від того, що ми завжди зосереджені на розділовому многочлені в Σ -схемі.

Висновки. Підводячи підсумки викладеного матеріалу, слід зазначити очевидні переваги запропонованого методу: найбільш ефективна розділова крива в Σ -схемі автоматично визначається по ймовірнісній геометрії даних, тому побудований Σ -класифікатор є повністю непараметричним; оскільки глибинна трансформація володіє ефектом нормалізації на даних, Σ -класифікатор, на відміну від більшості методів класифікації не вимагає проведення оцінки таких параметрів, як середнє значення та масштаб; результат класифікації може бути інформативно представлений на двовимірній Σ -схемі, що є значно простішою задачею, ніж відстеження результату класифікації у вихідному просторі вибірки великої розмірності.

Список використаних джерел

1. Zuo Y.J. Projection-based depth functions and associated medians / Y.J. Zuo // *The Annals of Statistics*. – 2003. – 31. – P. 1463-1484.
2. Cuesta-Albertos J.A. The random Tukey depth / J.A. Cuesta-Albertos, A. Nieto-Reyes // *Computational Statistics & Data Analysis*. – 2008. – 52. – P. 4980-4987.
3. Анисимов А.В. Исследование асимптотических свойств непараметрических классификаторов на основе функций глубины / А.В. Анисимов, А.А. Галкин // *Проблемы управления и информатики*. – 2015. – №4. – С. 147-155.
4. Li J. New nonparametric tests of multivariate locations and scales using data depth / J. Li, R.Y. Zuo // *Statistical Science*. – 2004. – 19. – P. 687-694.
5. Lange T. Fast nonparametric classification based on data depth / T. Lange, K. Mosler, P. Mozharovskiy // *Statist. Papers*. – 2014. – 55. – P. 53-67.
6. Галкін О.А. Застосування функцій згладжування для апроксимації оцінок непараметричних класифікаторів / О.А. Галкін // *Інтелектуальні системи прийняття рішень та проблеми обчислювального інтелекту (ISDMCI 2015): Матеріали міжнародної наукової конференції*. – Херсон, 2015. – С. 266-267.

References

1. ZUO, Y.J. (2003) Projection-based depth functions and associated medians. *The Annals of Statistics*. 31. p. 1463-1484.
2. CUESTA-ALBERTOS, J.A. and NIETO-REYES, A. (2008) The random Tukey depth. *Computational Statistics & Data Analysis*. 52. p. 4980-4987.
3. ANISIMOV, A. and GALKIN, A. (2015) The research of the asymptotic properties of nonparametric classifiers based on depth functions. *Journal of Automation and Information sciences*. 4. p. 147-155.
4. VARDI, Y. & ZHANG, C.H. (2000) The multivariate on L_1 -median and associated data depth. *Proceedings of the National Academy of Sciences (USA)*. 97. p.1423-1426.
5. LANGE, T., MOSLER K., MOZHAROVSKIY P. (2014) Fast nonparametric classification based on data depth. *Statist. Papers*. 55. p. 53-67.
6. GALKIN, O. (2015) Application of smoothing functions to approximate estimates of nonparametric classifiers. *Intellectual Systems for Decision Making and Problems of Computational Intelligence: Conference Proceedings*. – KNTU, 2015. p. 266-267.

Надійшла до редколегії 27.08.15

УДК 519.6

Галкін О. В., к. ф.-м. н., доцент,
Верес М.М., к. ф.-м. н., доцент,
Поляченко А.І., студент

Застосування кусково-лінійних моделей в задачах прогнозування

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Володи-
мирська 64.

e-mail: galkin@unicyb.kiev.ua
veres@unicyb.kiev.ua
apolyachenko@mail.ru

O. V. Galkin, PhD,
M.M. Veres, PhD,
A. I. Polyachenko, student

The use of piecewise linear regression in forecasting problems

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01033, Kyiv, Volodymyrska st.64.

e-mail: galkin@unicyb.kiev.ua
veres@unicyb.kiev.ua
apolyachenko@mail.ru

*В даній статті аналізується кусково-лінійна регресійна модель та її використання для розв'язку
апроксимаційних задач.*

Ключові слова: кусково-лінійна модель, задачі апроксимації, регресійний аналіз.

*In this paper we analyze the models of piecewise linear regression and its application for solving the
problem of approximation. We discuss the algorithm for finding the linear models, which are included in a
piecewise linear model. Elementary linear model (built by OLS or similar methods) is used to rank the input
data in ascending values of the factors, taking into account their impact on the value of the objective
function, which also helps to smooth changes in the values of the dependent variable. The next step is the
construction and analysis of implicit models which are aggregated by linear model. Each of these implicit
models are built for separate of the observation period for which the standardized coefficient of
determination is verified. Therefore, the each implicit model is bounded to the considered interval. This
approach allows to build the correct implicit models, thereby ensuring the correctness of the resulting
aggregated model. The result of the algorithm is aggregated piecewise linear partially defined regression
model. The next important step in the construction of the aggregate of the linear model is extended the
model which was obtained in previous step at entire the observation interval. At the end we discuss the
application the aggregating model for calculating the predicted value of the desired function. As an example
of the approach depending on the performance of mobile devices on the technical characteristics of its
components is considered.*

Key Words: piecewise linear regression, approximation problem, regression analysis.

Статтю представив д.т.н., проф. Заславський В.А.

Вступ. Методи регресійного аналізу
широко використовуються для розв'язку
величезного спектру різноманітних задач.
Наприклад в економетриці при побудові
економіко-статистичних моделей ^[1,2], у квантовій
фізиці для аналізу стану квантів ^[3], в астрономії
для аналізу кореляцій спектральних та термічних
даних космічних тіл ^[4,5] та інші.

Регресійний аналіз дозволяє побудувати
апроксимацію залежності шуканої функції від
обраних параметрів (факторів) у вигляді деякої
математичної моделі, використовуючи дані
спостережень. Традиційно виділяють лінійний та

нелінійний регресійний аналіз, які відповідним
чином відрізняються типом математичної моделі.
З одного боку, лінійні моделі значно простіші з
точки зору побудови та аналізу в силу наявності
добре опрацьованого теоретичного базису, але, з
іншого боку, переважна більшість реальних
процесів та залежностей мають нелінійну
природу, що призводить до виникнення значної
похибки наближення при використанні лінійних
моделей. У свою чергу, нелінійні моделі є значно
більш потужними у сенсі коректного відтворення
поведінки шуканої функції, але, вони є
недостатньо вивченими, що призводить до

виникнення суттєвих труднощів при їх побудові та аналізі.

Для того щоб зберегти вказані переваги лінійних моделей та водночас дозволити їм адекватно відображати поведінку несуттєво нелінійних шуканих залежностей може бути використана кусково-лінійна регресійна модель.

Кусково-лінійна регресійна модель. Для зручності подальшого розгляду кожному окремому лінійну модель, що входить до кусково-лінійної моделі будемо називати внутрішньою моделлю, а всю кусково-лінійну модель агрегованою або багатоскладовою лінійною моделлю.

Першим кроком є побудова звичайної лінійної моделі (за допомогою МНК або подібних методів) ^{[1] [2] [6]}, що охоплює весь інтервал спостережень, яка визначає шукані залежності у першому наближенні, які є основою для побудови агрегованої моделі. Створена лінійна модель дозволяє проаналізувати доцільність використання агрегованої моделі, оскільки остання передбачає наявність достатньої кількості інтервалів зміни факторів, на яких лінійна апроксимація має невелику похибку наближення.

Отримана лінійна модель використовується для впорядкування вхідних даних за зростанням значень факторів з урахуванням їх впливу на значення цільової функції. Ранжування дозволяє не тільки отримати згруповані за схожістю набори значень факторів, а і згладити зміни значень залежної змінної. Сусідні спостереження завжди будуть найбільш схожими у розумінні мінімальності ранжованої зміни значень факторів, тобто фактично відбувається мінімізація амплітуди стрибків цільової функції при переході від одного спостереження, до іншого, що безумовно позитивно відображається на якості лінійної моделі, яка будується.

Для визначення впливу окремих факторів можуть бути використані значення стандартизованих коефіцієнтів регресії:

$$\beta_i = b_i \frac{\sigma_{x_i}}{\sigma_y},$$

де, β_i – i -тий стандартизований коефіцієнт регресії, b_i – i -тий звичайний коефіцієнт регресії, σ_{x_i} – середньоквадратичне відхилення i -того фактору в лінійній регресійній моделі, σ_y – середньоквадратичне відхилення значень функції.

Оскільки стандартизовані коефіцієнти регресії є порівнюваними, всі фактори моделі можуть бути ранжовані відповідно до значень цих коефіцієнтів.

Наступного етапу відповідає створенню та аналізу внутрішніх моделей агрегованої лінійної моделі. На кожному кроці розглядається певний інтервал спостережень, для якого будується окрема лінійна модель. Далі перевіряється, чи є стандартизований коефіцієнт детермінації отриманої моделі більшим, ніж порогове значення. У цьому випадку модель прив'язується до розглянутого інтервалу та зберігається. Перебір інтервалів відбувається таким чином, що всі можливі підінтервали вихідного інтервалу довжини n гарантовано будуть розглянуті до того як почати розгляд інтервалів довжини $n-1$. Це досягається шляхом зміни початку підінтервалу при фіксованій довжині цього інтервалу, причому на першому кроці підінтервал, що розглядається, співпадає з вихідним інтервалом, з подальшим зменшенням розміру підінтервалу доки не буде знайдена підходяща модель, чи розмір підінтервалу стане меншим за дозволений. Така організація перебору дозволяє надати пріоритет більшим інтервалам, а відповідно і менш спеціалізованим (більш стійким) внутрішнім моделям. Наприклад, для інтервалу $[1, n]$ послідовно розглядаються лінійні моделі що охоплюють такі його підінтервали:

$$[1, n], [1, n-1], [2, n], [1, n-2], [2, n-1], [3, n] \dots$$

Тобто, спочатку використовуються всі підінтервали довжини $[n]$, потім $[n-1]$ і так далі. Слід зазначити, що під час побудови лінійних моделей потрібно розв'язувати систему нормальних рівнянь (згідно з методом МНК) і іноді отримана матриця коефіцієнтів є сингулярною або близькою до сингулярної. Для розглянутого алгоритму обидві ситуації не є проблемними, оскільки некоректні моделі не можуть пройти бар'єр перевірки значення стандартизованого коефіцієнта детермінації. На практиці такий підхід дозволяє неявно відсіювати всі проблемні моделі, тим самим забезпечуючи коректність результуючої агрегованої моделі.

Результатом роботи алгоритму є агрегована кусково-лінійна частково-визначена (у розумінні того, що деякі спостереження можуть не входити до області визначення жодної з внутрішніх моделей) регресійна модель вигляду:

$$M(x) = \begin{cases} m_1(x), & \text{якщо } x \in [a_1, b_1] \\ m_2(x), & \text{якщо } x \in [a_2, b_2] \\ \dots \\ m_k(x), & \text{якщо } x \in [a_k, b_k] \end{cases},$$

де $M(x)$ – агрегована модель, x – вектор значень факторів, k – кількість внутрішніх моделей, $m_i(x)$ – i -та внутрішня лінійна модель, $[a_i, b_i]$ – інтервал значень вхідних даних, на якому визначена i -та внутрішня модель, причому має місце нерівність:

$$S' = \bigcup_{i=1}^k \{a_i, b_i\} \subseteq S$$

де $\{a_i, b_i\}$ – множина вхідних даних, що входять до області визначення i -тої внутрішньої моделі, S' – множина вхідних даних, на яких побудована агрегована модель $M(x)$ є визначеною, S – множина всіх вхідних даних, тобто модель $M(x)$ за побудовою є невизначеною на вхідних даних з множини $S - S'$.

Позначимо кількість факторів, що розглядаються при побудові внутрішніх лінійних моделей як l . Тоді для того, щоб на інтервалі вхідних даних $[a_i, b_i]$ можна було побудувати лінійну регресійну модель з використанням методу МНК необхідно виконання умови:

$$\forall i \in [1, k]: \text{card}(\{a_i, b_i\}) \geq l + 1$$

де card – потужність відповідної множини. Таким чином, для кількості внутрішніх моделей агрегованої моделі $M(x)$ має місце нерівність

$$1 \leq k \leq \left\lfloor \frac{\text{card}(S)}{l + 1} \right\rfloor.$$

Наступним важливим кроком при побудові агрегованої лінійної моделі є довизначення отриманої моделі на всіх інтервалах спостережень, що не були використані при побудові жодної внутрішньої моделі. Довизначення полягає у розширенні інтервалів роботи внутрішніх моделей таким чином, щоб не залишилось невизначених спостережень і водночас забезпечити мінімізацію сумарної похибки. Таким чином, спочатку визначаються та локалізуються всі інтервали спостережень, які не увійшли до жодної моделі, а потім розглядаються декілька випадків: якщо невиключений інтервал межує тільки з однією моделлю, то інтервал визначення цієї моделі розширюється, щоб включити цей інтервал, в іншому випадку невиключений інтервал розподіляється між

сусідніми моделями таким чином, щоб сумарна похибка була мінімальною. Для цього розраховується похибка кожної з моделей при застосуванні до спостережень із поточного інтервалу і обирається такий розподіл цих спостережень, щоб приріст похибки моделей після розширення їх дії на поточний інтервал був мінімальний. У результаті всі невраховані при побудові внутрішніх моделей спостереження будуть додані у відповідні області визначення цих моделей з мінімально можливою похибкою, тобто модель після розширення стає визначеною на всіх наявних спостереженнях.

У цьому випадку проводиться аналіз оптимального розділення поточного інтервалу між межуючими внутрішніми моделями, де в якості критерія оптимальності виступає мінімізація суми квадратів похибки результуючої агрегованої моделі (за аналогією до критерію оптимальності МНК). Враховуючи, що кожна внутрішня лінійна модель має неперервну область визначення, розподіл невиключеного інтервалу даних $[a, b]$ зводиться до вибору такого індексу $i_a - 1 \leq i \leq i_b$, де i_a – індекс елемента a у впорядкованому масиві вхідних даних, i_b – індекс елемента b у впорядкованому масиві вхідних даних. Підінтервал вихідного інтервалу з індексами елементів $i_a \dots i$ додаються до області визначення $m_l(x)$, а елементи з індексами $i + 1 \dots i_b$ додаються до області визначення $m_r(x)$, де $m_l(x)$ – ліва сусідня внутрішня модель, $m_r(x)$ – права сусідня внутрішня модель, причому сумарна похибка після довизначення цих моделей є мінімальною. Формально задачу вибору цього індексу можна записати так:

$$I = \arg \min_{i \in [i_a - 1, i_b]} \left(\sum_{k=i_a}^i e_{l_k}^2 + \sum_{k=i+1}^{i_b} e_{r_k}^2 \right)$$

де I – шуканий індекс розбиття невиключеного інтервалу $[a, b]$, $e_{l_k}^2$ – квадрат похибки моделі $m_l(x)$ при застосуванні до вектора вхідних даних з індексом k , $e_{r_k}^2$ – квадрат похибки моделі $m_r(x)$ при застосуванні до вектора вхідних даних з індексом k (вхідні дані відсортовані за зростанням значень факторів із врахуванням їх пріоритету). Таким чином, у результаті після вибору індексу I підінтервал вихідного інтервалу $[a, b]$, якому відповідають елементи вхідних з індексами $i_a \dots I$ будуть додані до

області визначення $m_l(x)$, елементи з індексами $l+1 \dots i_b$ – до моделі $m_r(x)$ і отримана агрегована модель буде гарантовано мати мінімальний можливий сумарний квадрат похибки.

Останнім питанням є особливості реалізації застосування побудованої агрегованої моделі для розрахунку прогнозованого значення шуканої функції. Загалом цей процес може бути розділений на два етапи: пошук відповідної внутрішньої лінійної моделі та її застосування для отримання результуючого значення. Для того, щоб визначити, яку внутрішню модель необхідно використати, потрібно співставити передані значення факторів із інтервалами визначеності внутрішніх моделей. Для цього з використанням бінарного пошуку знаходиться найбільш схоже спостереження з навчальної вибірки з врахуванням пріоритетів факторів. Після цього визначається внутрішня модель, яка пов'язана з цим спостереженням, та застосовується для розрахунку прогнозованого значення апроксимованої функції на переданих значеннях факторів. Якщо передані дані виходять за межі навчальної вибірки, то вони за замовчанням вважаються схожими на перше (або останнє відповідно) спостереження навчальної вибірки і розраховуються вже за вказаною схемою. Слід зазначити, що всі дані навчальної вибірки відсортовані за зростанням значень факторів з урахуванням їх пріоритетів.

Застосування кусково-лінійної моделі для апроксимації швидкодії комп'ютерів. У якості апроксимації шуканої залежності продуктивності мобільних комп'ютерних пристроїв від характеристик внутрішніх компонентів розглядається лінійна модель вигляду:

$$y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + a,$$

де y – час виконання тесту wPrime^[9] (дійсне додатне число секунд), x_1 – номінальна частота центрального процесора (дійсне додатне число гігагерц), x_2 – кількість фізичних ядер центрального процесора (ціле додатне число), x_3 – об'єм процесорного кешу (додатне ціле число кілобайтів), x_4 – об'єм оперативної пам'яті (додатне ціле число мегабайтів), a – вільний член регресії. У якості вхідних даних виступають 96 конфігурації ноутбуків разом із значенням тесту wPrime. У якості порогового значення

стандартизованого коефіцієнту детермінації використовується значення 0.7.

На рисунку 1 наведено поведінку створеної лінійної регресійної моделі у порівнянні з реальними значеннями показника синтетичної продуктивності.

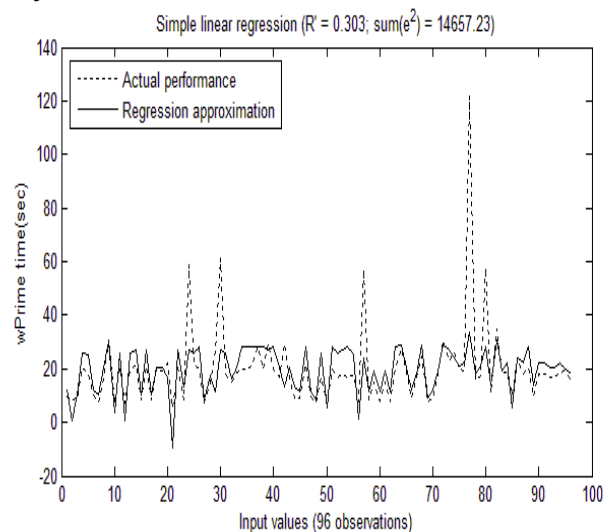


Рис. 1 Поведінка лінійної регресійної моделі

Стандартизований коефіцієнт детермінації дорівнює 0.3, тобто ця модель визначає приблизно 30% дисперсії вхідних даних. Таким чином, апроксимувати залежність продуктивності від вказаних факторів, використовуючи єдину лінійну модель, не вдається, оскільки вихідна залежність має нелінійну природу.

Можна помітити, що на значних фрагментах вхідних даних апроксимація має невелику похибку. Отже, можна застосувати кусково-лінійну модель для поліпшення якості апроксимації.

Першим кроком є ранжування факторів за їх впливом на продуктивність. Значення стандартизованих коефіцієнтів регресії у цьому випадку складають (-0.29; -0.36; 0; 0). Порівнюючи їх за модулем, отримуємо, що найбільш важливим фактором є кількість ядер процесора, наступним за важливістю параметром виступає номінальна тактова частота процесора, далі об'єм кешу та оперативної пам'яті, тобто ранжування факторів за спаданням значимості має вигляд (2; 1; 3; 4), де i -тому пріоритету відповідає вихідний фактор з вказаним індексом. Цей масив пріоритетів використовується для сортування вхідних даних за зростанням значення факторів.

Наступний крок полягає у побудові внутрішніх моделей шуканої агрегованої моделі. Перша задовільна лінійна модель знаходиться при розгляді інтервалу [1, 66], який включає 66 спостережень. Побудована лінійна модель проходить перевірку на застосовність, маючи детермінацію на рівні 87.3%, що відповідає досить якісній апроксимації поведінки шуканої функції на вказаному інтервалі. Оскільки модель, що задовольняє критерій застосовності, знайдена, то подальший пошук моделей припиняється і алгоритм переходить до аналізу необроблених фрагментів вхідного інтервалу [1, 96]. У даному випадку, необробленим є тільки інтервал [67, 96], для якого алгоритм побудови моделі викликається рекурсивно. У результаті цього виклику отримуємо модель, що охоплює інтервал [67, 95] з 29 спостережень та має стандартизований коефіцієнт детермінації рівний 70%. Таким чином у результаті роботи розглянутої частини алгоритму було створено дві лінійні моделі, які охоплюють інтервали спостережень [1, 66] та [67, 95] зі значеннями стандартизованих коефіцієнтів детермінації не менших за порогове значення 0.7.

Без розгляду залишилося лише одне спостереження, яке не увійшло до жодного побудованого інтервалу. Цьому спостереженню відповідають такі значення факторів: номінальна тактова частота процесора 3.3 гігагерц, 6 фізичних ядер, 15360 кілобайт кешу та 32768 мегабайти оперативної пам'яті з результатом виконання тесту wPrime у 5,29 секунд, що суттєво вирізняє цю конфігурацію ноутбука за значеннями факторів та результатом з-поміж інших ноутбуків, які аналізувалися, що і слугує причиною того, що саме це спостереження не увійшло до жодної побудованої моделі, оскільки включення його до будь-якої з них призводить до суттєвого зменшення значення стандартизованого коефіцієнта детермінації, який є визначальним при вирішенні питання про вилучення моделі з розгляду. Оскільки, єдине нерозглянуте спостереження може бути внесено тільки до області визначення моделі заданої на спостереженнях [67, 95], то довизначення створеної моделі обмежується цим кроком.

Аналогічним чином було побудовано агреговані моделі із трьома та чотирма внутрішніми моделями. На рисунку 2 наведено візуалізацію їх поведінки на початкових даних спостережень.

Особливий інтерес представляє вивчення залежності кількості внутрішніх моделей,

покриття даних (співвідношення кількості спостережень, які були використані при побудові внутрішніх моделей до загальної кількості спостережень), та помилки моделі від заданого порогового значення стандартизованого коефіцієнта детермінації.

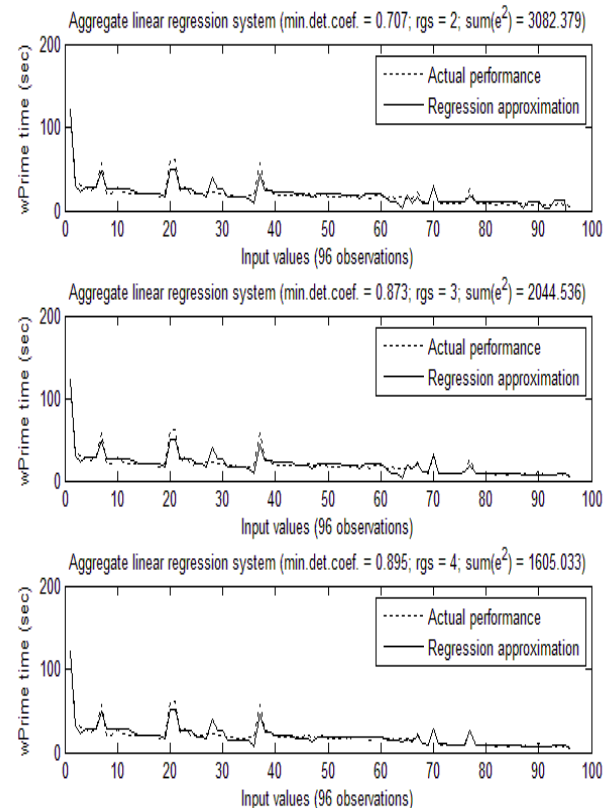


Рис 2. Агреговані моделі із трьома та чотирма внутрішніми моделями

У загальному випадку збільшення порогового значення коефіцієнта детермінації призводить до збільшення кількості внутрішніх моделей, але зростання не є монотонним, оскільки для деяких порогових значень кількість моделей може зменшитись. Оскільки підвищення стандартизованого коефіцієнту детермінації відповідає зменшенню похибки моделі, а за фіксованої форми моделі та незмінних вхідних даних цього можна досягти тільки спеціалізацією кожної внутрішньої моделі у розумінні звуження інтервалів спостережень, з якими вони працюють. Це призводить до збільшення кількості і розмірів інтервалів, які не охоплюються жодною моделлю, що створює потенційні можливості для побудови окремих моделей на таких інтервалах, тим самим збільшуючи загальну кількість внутрішніх моделей в агрегованій лінійній моделі.

Отже, вивчення цієї залежності без аналізу додаткових властивостей створюваних агрегованих лінійних моделей не дає можливості коректно порівнювати різні конфігурації таких моделей. Саме тому, наведені графіки відображають одразу декілька властивостей цих моделей у їх залежності від порогового значення стандартизованого коефіцієнта детермінації. Друга частина цього графіку показує залежність так названого покриття даних від порогового значення детермінації (фактично цей параметр розраховується за формулою $\alpha = \frac{\text{card}(S')}{\text{card}(S)}$, де card – потужність множини, $0 \leq \alpha \leq 1$).

Збільшення порогу детермінації для внутрішньої моделі призводить до зменшення набору даних, з якими вона працює, тобто звужується інтервал спостережень, на якому вона застосовується.

Таким чином збільшення порогового значення коефіцієнту детермінації дійсно призводить до зменшення об'єму даних, з якими працює внутрішня лінійна модель.

Це, в свою чергу, дозволяє їй більш точно враховувати особливості поведінки шуканої функції на відповідному інтервалі спостережень, зменшуючи вплив викидів (аномальних спостережень) та мінімізуючи похибку апроксимації.

Список використаних джерел

1. Елисеєва И.И. Экономика / И.И. Елисеєва. – Москва: Финансы и статистика, 2007. – 343с.
2. Кремер Н.Ш. Эконометрика / Н.Ш.Кремер. Б.А. Путко. – Москва: Юнити, 2002. – 311с.
3. Qi B. Quantum State Tomography via Linear Regression Estimation / B. Qi., Z. B. Hou et al. // Scientific Reports. – 2013. – v.3:3496
4. Ascenso J. The extinction law from photometric data: linear regression methods / J. Ascenso, M. Lombardi et al. // Astronomy & Astrophysics. – 2012. – 540 – P. 139-154. arXiv:1203.5257 [astro-ph.GA]
5. Демиденко Е.З. Линейная и нелинейная регрессии / Е.З.Демиденко. – Москва: Финансы и статистика, 1982. – 304с.
6. Ивахненко А. Г. Моделирование сложных систем по экспериментальным данным / А. Г. Ивахненко, Ю. П. Юрачковский. – Москва: Радио и связь, 1987. – 117 с.
7. Ивахненко А. Г. Моделирование сложных систем / А. Г. Ивахненко. – Киев: Вища школа, 1987. – 63 с.
8. Song W. Robust mixture regression model fitting by Laplace distribution / W Song, W Yao, Y Xing // Computational Statistics & Data Analysis. – 2014. – v.71 – P. 128-137.
9. wPrime Multi-threaded Benchmark. [Online] Available from: <http://www.wprime.com>

References

1. ELISEEVA, I.I. (2007) *The Economy*. Moscow: Finance and Statistics.
2. KREMER, N.S., PUTKO, B.A. (2002) *Econometrics*. Moscow: Unity.
3. QI, B., HOU, Z. B. et al. (2013) *Quantum State Tomography via Linear Regression Estimation*. Scientific Reports. v.3:3496
4. ASCENSO, J., LOMBARDI, M. et al. (2012) *The extinction law from photometric data: linear regression methods*. Astronomy & Astrophysics 540, pp. 139-154. arXiv:1203.5257 [astro-ph.GA]
5. DEMIDENKO, E.Z. (1982) *Linear and nonlinear regression*. Moscow: Finance and Statistics.
6. IVAKHNENKO, A.G., YURACHKOVSKY, Y.P. (1987) *Simulation of complex systems from experimental data*. Moscow: Radio and Communication.
7. IVAKHNENKO, A.G. (1987) *Modeling of complex systems*. Kyiv: Vishcha Shkola.
8. SONG, W., YAO, W. and XING, Y. (2014) *Robust mixture regression model fitting by Laplace distribution*. Computational Statistics & Data Analysis, v.71, pp.128-137.
9. wPrime Multi-threaded Benchmark. [Online] Available from: <http://www.wprime.com>

Надійшла до редколегії 02.09.15

УДК 517.929.4

Гаркуша Н.І., к. е. н., пров.інж.

**Дослідження динаміки однієї математичної
моделі популяції при малих щільностях
популяції жертви**

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

N. I. Garkusha, PhD, senior researcher

**Investigation dynamics of mathematical
model of the of population with low
densities of prey**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova av., 4d,
e-mail: ngarkusha@gmail.com

Розглядається система рівнянь динаміки популяцій при малій щільності популяції жертви. Вона має вигляд системи двох нелінійних звичайних диференціальних рівнянь з параметрами, що визначають швидкість розмноження популяції жертви у відсутності хижака, питомої швидкості споживання популяцією хижака жертви при одиничній щільності, природної смертності хижака, величини, зворотної щільності популяції жертви. Визначаються положення рівноваги системи. Проведено дослідження стійкості ненульового положення рівноваги.

Ключові слова: математична модель, динамічна система, диференціальні рівняння, запізнювання.

The research of stability of the zero position of the equilibrium of a mathematical model describing the dynamics of populations, taking into account the low density of the prey population. The model is a system of two ordinary differential equations with a constant delay. The linear part of the system is a phase coordinate with the corresponding coefficient, nonlinear is a rational vector function. The system has two equilibrium positions. The first is a zero solution and corresponds to the absence of two populations. The second is a stationary point in the first quadrant. A study conducted by the linearization of the system near the non-zero equilibrium position. It is shown that a non-zero equilibrium position is asymptotically stable. Given the time of maturation of individuals, it is believed that a more adequate mathematical model of a system with aftereffect delay type. The initial system is written in the form of quasi-linear, where the coefficients of the linear part of the phase coordinates are dependent on the prehistory. The stability of the equilibrium position of non-zero delay. To study again used the device linearization in the neighborhood of the point. In contrast to the original system, the characteristic equation of the multiplier includes exhibitor delay. The conditions of the asymptotic stability.

Key words: mathematical model, dynamic system, differential equations, delay.

Статтю представив д.ф.-м.н, проф. Хусаїнов Д. Я.

Вступ

У запропонованій роботі продовжено дослідження математичних моделей динаміки популяцій типу «хижак-жертва», раніше опублікованих у статтях [3-5]. Однією з перших робіт з дослідження математичних моделей динаміки популяцій відносять до [1]. В подальших роботах було складено ряд математичних моделей взаємодіючих популяцій типу «хижак-жертва». Моделі описувались системами двох звичайних диференціальних рівнянь. Більш складні моделі наведені в [2]. Особливістю наведеної роботи є врахування ефекту «запізнення»,

обумовленого часом «статевого дозрівання популяції».

1. Система без запізнення

Система диференціальних рівнянь динаміки популяцій при малих щільностях популяції жертви має вигляд [2, стор. 53-54]

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= \left[a - \frac{bx(t)y(t)}{1 + Px(t)} \right] x(t), \\ \dot{y}(t) &= - \left[c - \frac{dx^2(t)}{1 + Px(t)} \right] y(t).\end{aligned}\quad (1)$$

Тут a – швидкість росту популяції жертви в умовах відсутності хижака, b – питома

швидкість споживання популяцією хижака жертви при одиничній щільності, c – природня смертність хижака, P – величина, зворотня до щільності популяції жертви.

Стани рівноваги системи (1) визначаються системою рівнянь

$$\left[a - \frac{bx(t)y(t)}{1+Px(t)} \right] x(t) = 0, \left[c - \frac{dx^2(t)}{1+Px(t)} \right] y(t) = 0.$$

Вони є двома особливими точками системи (1) і мають вигляд

$$O(0,0), O_1(x_1, y_1), x_1 = \frac{Pc + \sqrt{P^2c^2 + 4cd}}{2d},$$

$$y_1 = a \frac{Pc + \sqrt{P^2c^2 + 4cd}}{2bc}. \quad (2)$$

Перша особлива точка являє собою відсутність популяції і не має інтересу. Проведемо дослідження другої особливої точки. Система лінійного наближення в околі цієї особливої точки має вигляд

$$\dot{x}(t) = P_x(x, y)|_{(x_1, y_1)}(x(t) - x_1) +$$

$$+ P_y(x, y)|_{(x_1, y_1)}(y(t) - y_1),$$

$$\dot{y}(t) = Q_x(x, y)|_{(x_1, y_1)}(x(t) - x_1) +$$

$$+ Q_y(x, y)|_{(x_1, y_1)}(y(t) - y_1), \quad (3)$$

де

$$P(x, y) = \left[a - \frac{bxy}{1+Px} \right] x, \quad Q(x, y) = - \left[c - \frac{dx^2}{1+Px} \right] y.$$

Обчисливши похідні, отримаємо

$$\dot{x}(t) = \left[a - b \left(\frac{1}{(1+Px_1)^2} + \frac{1}{1+P_1} \right) x_1 y_1 \right] (x(t) - x_1) -$$

$$- \frac{bx_1^2}{1+Px_1} (y(t) - y_1).$$

Позначимо

$$a_{11} = a - b \frac{x_1 y_1}{1+Px_1}, \quad a_{22} = -c + d \frac{x_1^2}{1+Px_1},$$

$$b_{11} = -b \frac{x_1 y_1}{(1+Px_1)^2}, \quad b_{12} = -b \frac{x_1^2}{(1+Px_1)^2},$$

$$b_{21} = d \left(\frac{1}{(1+Px_1)^2} + \frac{1}{1+Px_1} \right) x_1 y_1. \quad (4)$$

Тоді система лінійного наближення буде мати вигляд

$$\dot{x}(t) = (a_{11} + b_{11})(x(t) - x_1) + b_{12}(y(t) - y_1),$$

$$\dot{y}(t) = b_{21}(x(t) - x_1) + a_{22}(y(t) - y_1). \quad (5)$$

Або у векторно-матричному вигляді

$$\dot{z}(t) = (A + B)z(t), \quad A = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix},$$

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix}, \quad z(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix}.$$

Характеристичне рівняння системи (5) в зміщеній точці $O_1(x_1, y_1)$ буде мати вигляд

$$\lambda^2 + 2\sigma\lambda + \Delta = 0,$$

де

$$\sigma = -\frac{1}{2}(a_{11} + a_{22} + b_{11}),$$

$$\Delta = [(a_{11} + b_{11})a_{22} - b_{12}b_{21}],$$

Необхідною і достатньою умовою асимптотичної стійкості стану рівноваги, згідно критерію Гурвіца для двовимірних систем, буде додатність коефіцієнтів, тобто

$$a_{11} + a_{22} + b_{11} < 0, \quad (a_{11} + b_{11})a_{22} - b_{12}b_{21} > 0.$$

Підставивши вихідні значення, отримаємо наступні нерівності

$$a - c + x_1 \frac{dx_1 - by_1}{1+Px_1} - \frac{bx_1 y_1}{(1+Px_1)^2} < 0,$$

$$\left[a - bx_1 y_1 \frac{x_1 y_1}{1+Px_1} \left(1 + \frac{1}{1+Px_1} \right) \right] \left(-c + d \frac{x_1^2}{1+Px_1} \right) -$$

$$+ bd \frac{x_1^3 y_1}{(1+Px_1)^3} \left(1 + \frac{1}{1+Px_1} \right) > 0. \quad (6)$$

І при виконанні умов (6) другий стан рівноваги є асимптотично стійким.

2. Система з післядією

В роботах [3-5] було запропоновано розглядати вплив запізнення, обумовленого часом дозрівання особи. Диференціальні рівняння (1) в цьому випадку мають вигляд

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= \left[a - \frac{bx(t-\tau)y(t-\tau)}{1+Px(t-\tau)} \right] x(t), \\ \dot{y}(t) &= \left[c - \frac{dx^2(t-\tau)}{1+Px(t-\tau)} \right] y(t).\end{aligned}\quad (5)$$

Система рівнянь із запізненням має ті ж стани рівноваги, що і система без запізнення. Дослідження їх будемо проводити з використанням методу лінійного наближення в околі кожної з особливих точок. Особливих точок, як і для системи без запізнення, дві. Ними також є точки $O(0,0)$ і $O_1(x_1, y_1)$.

Знову розглянемо другу точку особливу $O_1(x_1, y_1)$. Система двох рівнянь з запізненням має вигляд

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= P(x(t), y(t), x(t-\tau), y(t-\tau)), \\ \dot{y}(t) &= Q(x(t), y(t), x(t-\tau), y(t-\tau)).\end{aligned}$$

Система лінійного наближення в околі другої особливої точки буде мати вигляд

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= P_{x(t)}(x_1, y_1, x_1, y_1)(x(t) - x_1) + \\ &+ P_{y(t)}(x_1, y_1, x_1, y_1)(y(t) - y_1) + \\ &+ P_{x(t-\tau)}(x_1, y_1, x_1, y_1)(x(t-\tau) - x_1) + \\ &+ P_{y(t-\tau)}(x_1, y_1, x_1, y_1)(y(t-\tau) - y_1), \\ \dot{y}(t) &= Q_{x(t)}(x_1, y_1, x_1, y_1)(x(t) - x_1) + \\ &+ Q_{y(t)}(x_1, y_1, x_1, y_1)(y(t) - y_1) + \\ &+ Q_{x(t-\tau)}(x_1, y_1, x_1, y_1)(x(t-\tau) - x_1) + \\ &+ Q_{y(t-\tau)}(x_1, y_1, x_1, y_1)(y(t-\tau) - y_1).\end{aligned}$$

Або у вигляді

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= \left(a - b \frac{x_1 y_1}{1 + P x_1} \right) (x(t) - x_1) - \\ &- b \frac{x_1 y_{11}}{(1 + P x_1)^2} (x(t-\tau) - x_1) - \\ &- b \frac{x_1^2}{(1 + P x_1)} (y(t-\tau) - y_1), \\ \dot{y}(t) &= \left(-c + d \frac{x_1^2}{1 + P x_1} \right) (y(t) - y_1) +\end{aligned}$$

$$+ \left(\frac{1}{(1 + P x_1)^2} + \frac{1}{1 + P x_1} \right) (x(t-\tau) - x_1)$$

Або у векторно-матричному вигляді

$$\dot{z}(t) = Az(t) + Bz(t-\tau). \quad (6)$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix}, \quad z(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix},$$

$$z(t-\tau) = \begin{pmatrix} x(t-\tau) \\ y(t-\tau) \end{pmatrix},$$

з коефіцієнтами, що обчислені вище в (4).

Характеристичне рівняння системи з запізненням (6) має вигляд

$$\begin{aligned}\det(A + e^{-\lambda\tau}B - \lambda I) &= \begin{vmatrix} a_{11} + e^{-\lambda\tau}b_{11} - \lambda & e^{-\lambda\tau}b_{12} \\ e^{-\lambda\tau}b_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = \\ &= \lambda^2 + [(a_{11} + a_{22}) + b_{11}e^{-\lambda\tau}]\lambda + \\ &+ (a_{11}a_{22} + a_{22}b_{11}e^{-\lambda\tau} - b_{11}b_{21}e^{-2\lambda\tau}) = 0.\end{aligned}$$

Якщо корені характеристичного рівняння системи без запізнення мають лише від'ємні дійсні частини, то, в силу неперервності, ця властивість зберігається і для систем з запізненням. Тобто, існує $\tau_0 > 0$, що при $0 < \tau < \tau_0$ стаціонарний розв'язок системи з запізнюванням також буде асимптотично стійкий.

Нехай умови асимптотичної стійкості (6) виконуються. Для обчислення «гарантованої» величини запізнення будемо робити наступним чином. Перепишемо характеристичне рівняння у вигляді

$$\begin{aligned}\lambda^2 - [(a_{11} + a_{22}) + b_{11}]\lambda + \\ + (a_{11}a_{22} + a_{22}b_{11} - b_{12}b_{21}) + b_{11}(e^{-\lambda\tau} - 1)\lambda + \\ + a_{22}b_{11}(e^{-\lambda\tau} - 1) - b_{11}b_{21}(1 - e^{-2\lambda\tau}) = 0.\end{aligned}$$

Позначимо

$$\begin{aligned}F(\lambda, \tau) &= \lambda^2 - [(a_{11} + a_{22}) + b_{11}]\lambda + \\ &+ (a_{11}a_{22} + a_{22}b_{11} - b_{12}b_{21}) + b_{11}(e^{-\lambda\tau} - 1)\lambda + \\ &+ a_{22}b_{11}(e^{-\lambda\tau} - 1) - b_{11}b_{21}(1 - e^{-2\lambda\tau}), \\ F(\lambda, 0) &= \lambda^2 - [(a_{11} + a_{22}) + b_{11}]\lambda + \\ &+ (a_{11}a_{22} + a_{22}b_{11} - b_{12}b_{21}).\end{aligned}$$

Тоді

$$F(\lambda, \tau) = F(\lambda, 0) + b_{11}(e^{-\lambda\tau} - 1)\lambda + \\ + a_{22}b_{11}(e^{-\lambda\tau} - 1) - b_{11}b_{21}(1 - e^{-2\lambda\tau}).$$

Функція $F(\lambda, 0)$ за змінною λ являє собою параболу, опуклу вниз. Оскільки умови асимптотичної стійкості (6) виконуються, то корені мають від'ємні дійсні частини. Нехай, для зручності, корені λ_1 , λ_2 дійсні, різні від'ємні. Тоді

$$F(\lambda_1, 0) = F(\lambda_2, 0) = 0.$$

А для довільного λ , що знаходиться між ними

$$\lambda_1 < \lambda < \lambda_2 < 0$$

Буде виконуватись

Список використаних джерел

1. Malthus T.R. An Essay on the Principle of Population / T.R. Maltus.- London: Johnson, 1798. – 134 с.
2. Базыкин А.Д. Математическая биофизика взаимодействующих популяций / А.Д. Базыкин. – Москва: Наука, 1985. – 181 с.
3. Гаркуша Н.І. Про одну математичну модель динаміки взаємодіючих популяцій / Н.І. Гаркуша // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки. – 2014. - №4. – С. 135-138.
4. Гаркуша Н.І. Динаміка однієї екологічної моделі «хижак-жертва» без врахування вікової структури / Н.І. Гаркуша // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія кібернетика. – 2014. - №14. – С. 22-24.
5. Гаркуша Н.І. Отримання оцінки області стійкості положення рівноваги моделі популяції з післядією / Н.І. Гаркуша // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки. – 2015. - №2. – С. 123-127.

$$F(\lambda, 0) < 0.$$

Взявши $\bar{\lambda} = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2)$ отримаємо

$$F(\bar{\lambda}, 0) < 0, F(0, 0) > 0.$$

А тоді, в силу неперервності функції $F(\lambda, \tau)$,

ця нерівність буде зберігатись і при деякому $0 < \tau < \tau_0$, тобто

$$F(\bar{\lambda}, \tau) < 0, F(0, \tau) > 0.$$

Це означає, що «збуреним коренем» характеристичного рівняння буде від'ємне число і асимптотична стійкість зберігається і для системи з запізненням.

References

1. MALTHUS, T. (1798) *An Essay on the Principle of Population as it Affects the Future Improvement of Society, with Remarks on the Speculations of Mr. Godwin, M. Condorcet, and Other Writers*. London: Johnson.
2. BAZYKIN, A. (1985) *Mathematical Biophysics of Interacting Populations*. Moskva: Nauka.
3. GARKUSHA, N. (2014) About One Mathematical Model of the Dynamics of Interacting Population. In *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physcs&Mathematics*. №4.– p.135-138.
4. GARKUSHA, N. (2014) The Dynamics of the Ecological Model “Predator-Prey” without Age Structure. In *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Cybernetics*, №14. - p. 22-24.
5. GARKUSHA, N. (2015) Obtaining the estimation of the stability area of equilibrium in the model of population with aftereffect. In *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physcs&Mathematics*. №2.– p.123-127.

Надійшло до редколегії 10.08.2015 р.

УДК 517.9

Івохін Є.В.¹, д.ф.-м.н, доцент,
Вадньов Д.О.², пошукач

Ivohin E.V.¹, Dr.Sci., associate professor,
Vadnyev D.O.², researcher

Про реалізацію кількісних запитів в нечітких базах даних

About realization quantitative requests in fuzzy databases

^{1,2} Київський національний університет
імені Тараса Шевченка, м.Київ, пр-т Глушкова,
4д, e-mail: ivohin@univ.kiev.ua

^{1,2} Taras Shevchenko National University of Kyiv,
Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: ivohin@univ.kiev.ua

Для обробки неточно заданої та нечітко формалізованої інформації запропоновано підхід до формування, накопичення та актуалізації нечітких баз даних. Ступінь нечіткості атрибутів таблиць розраховується на основі чітких даних у вигляді спеціального представлення, яке створюється за допомогою операції розширення. Пропонується підхід для реалізації кількісних запитів до нечітких баз даних.

Ключові слова: реляційні бази даних, нечіткі множини, нечіткі трикутні числа, мова запитів, динамічні представлення, відношення переваги.

The relational databases and basic operations with them are considered. For treatment unexactly set and the unexpressly formalized information offered approach to the fuzzy databases formalization. It is introduced the concept of fuzzy database based on the composite fuzzy sets and fuzzification crisp data. The definition of the fuzzy database is given. The tool for the creation and updating of the fuzzy relational database is a query language SQL. The level of tables attributes fuzzyness accounts on the basis of clear information as the special presentation which is created by the expansion operation. The evaluation of belonging measure is performed by using the trapezoidal membership function. An example of creating a fuzzy database, resources for the manipulation (updating) tables and scheme of user interface are considered. For the example implementation was used MS Access application. This approach demonstrates a constructive tool for creating fuzzy data base on the operative formation of membership parameters for the data of corresponding fuzzy sets.

Key words: relational databases, fuzzy dataset, fuzzy triangle numbers, query language, dynamic view representations, relations of preference.

Статтю представив доктор технічних наук, с.н.с. Кудін В.І.

Сучасну інформаційну систем важко представити без використання баз або сховищ даних. Під цими поняттями, як правило, розуміють «набір структурованих даних, що підтримуються системою управління баз даних (СУБД), яка забезпечує різним додаткам потрібні дані у заданому вигляді» [1].

Однак, дане визначення є недостатньо конструктивним і слабо формалізованим. З іншого боку, зауважимо, що кожна програмна система, яка призначається для накопичення та обробки (актуалізації) даних, використовує інформаційну модель предметної області. У загальному випадку характерними категоріями, що формують таку модель, є об'єкти та відношення між ними. Такий підхід дозволяє визначити базу даних (БД) як об'єктно-орієнтований опис моделі, що базується на поняттях об'єктів та відношень, з повним або частковим фізичним розташуванням змістовних даних предметної

області на комп'ютерних носіях.

Використання моделі даних при роботі з БД дає можливість відображати особливості предметної області. За час існування розробок інформаційних систем запропоновано багато різних моделей з власними перевагами та недоліками.

Найбільш популярною є реляційна модель предметної області. В реляційній моделі вважається, що всі дані БД інформаційної системи представлені у вигляді таблиць [2]. Рядок кожної таблиці представляє собою кортеж неструктурованих одиниць даних або атрибутів. Набір кортежів, що складає таблицю, задає відношення: таким чином, модель даних визначається множиною таблиць-відношень (*R*-таблиць) або «реляцій».

Значення атрибутів кортежів і таблиць-відношень визначаються заданими разом з таблицями областями визначення (доменами). Множини значень різних стовбців в одній і тій

самій таблиці або в різних таблицях можуть задаватися одним доменом, а можуть – і різними. При чому, значення атрибутів в таблиці-відношенні мають лише один конкретний вигляд функціональної залежності один від іншого. Іншими словами, всі значення в довільному кортежі повинні окремо залежати лише від значення стовпця або групи стовбців – одних для всього відношення. Такий стовбець або група стовбців називається ключовими, а значення атрибутів в них – ключами.

В реляційній теорії визначений список операцій, які можна здійснювати над R -таблицями, отримуючи результат у вигляді R -таблиці. До таких операцій над базою даних відносять:

1) базові операції: обмеження; проекція; декартовий добуток двох таблиць; об'єднання; різниця; присвоювання (іменованій таблиці присвоюється значення виразу над R -таблицями).

2) похідні операції: з'єднання таблиць за деяким правилом; перетин таблиць; розширення таблиць новими стовбцями; сумування (зменшення рядків в таблиці за рахунок агрегування вихідних даних).

Крім постійних таблиць, що визначені в моделі інформаційної системи, операції над R -таблицями дозволяють отримувати таблиці-представлення, що дають можливість динамічно формувати набори кортежів з додатково заданими правилами їх формування.

Таким чином, констатуємо, що будь-яка прикладна проблемна область описується в термінах таблиць достатньо просто, що дозволяє суттєво спростити розробку інформаційних систем. Реляційна концепція баз даних може бути легко формалізована, базуючись на математичній моделі відношень. Якщо задано n множин $D_1, D_2, \dots, D_n$, тоді реляція R є множиною впорядкованих наборів виду $\langle d_1, d_2, \dots, d_n \rangle$, де d_1 - елемент з D_1 , ..., d_n - елемент з D_n . При цьому набори вигляду $\langle d_1, d_2, \dots, d_n \rangle$ визначають кортежі, а множини $D_1, D_2, \dots, D_n$ - домени.

Ідея реляційних баз даних стала популярною і серед розробників СУБД. Виходячи з того, що більша частина даних, які обробляються в інформаційних системах, носять кількісний характер, зросла зацікавленість в створенні способів та механізмів отримання конкретних даних. Універсальним засобом доступу до сховищ даних є мова запитів SQL, яка дозволяє зручно маніпулювати інформацією в різних реалізаціях моделей баз даних.

Мова SQL використовується для опису запитів до БД в спеціальних термінах. Припустимо, що потрібно отримати відомості про догово-

ри з усіма фірмами заданого регіону, в яких сума кошторисів складає приблизно 900000 гривень. Перелік можна отримати за допомогою наступного запиту мовою SQL:

*Select AgreementID from Agreements
Where Agreement.Sum >= 900000 and
Agreement.FirmRegion=1.*

Запити до БД формуються у вигляді чітких вимог до шуканих даних. Чіткі вимоги дозволяють отримувати конкретні результати пошуку в БД. Однак в запитах, що формулює користувач, досить часто присутні неточності та невизначеності. Якщо повернутися до наведеного прикладу, то договори з сумою 899000 гривень не попадають в результат виконання запиту, хоча їх характеристики є дуже близькими до вимог пошуку. Для забезпечення включення таких договорів в результат пошуку у запиті потрібно змінювати величини сум укладених договорів.

Зрозуміло, що в загальному випадку, коли з бази даних необхідно вибрати лінгвістично задану інформацію («молодий», «приблизно» «висока ефективність» і т.і.), реалізація такого запиту можлива лише за умов формалізації понять, які відносяться до категорії неточних, невизначених даних. Такі запити неможливо виконати стандартними засобами SQL.

Останнім часом багато уваги приділяється реалізації нечітких запитів. При цьому, сховища чітких даних з підтримкою чітких запитів були виділені групу так званих Crisp DataBases. В той же час, в реляційних базах даних з підтримкою нечітких запитів широко вживаються терміни «нечіткі бази даних» (Fuzzy DataBases). В БД з підтримкою механізмів нечітких запитів використовується підхід, що базується на ідеях нечітких множин Заде [3] і нечітких відносин з підтримкою формул нечіткої логіки.

Означення 1. Нечіткою множиною $\tilde{A}$ в універсальному просторі X називається сукупність пар вигляду $\{(x, \mu_{\tilde{A}}(x))\}$, де $x \in X$, а $\mu_{\tilde{A}}(x) : X \rightarrow [0,1]$ - функція належності нечіткої множини $\tilde{A}$.

Звичайна множина A з X може бути представлена у вигляді нечіткої множини, яка визначається характеристичною функцією:

$$\chi_A(x) = \begin{cases} 0 & x \notin A \\ 1 & x \in A \end{cases} \quad (1)$$

Означення 2. [4] Нечітким трикутним числом $\tilde{b}$ називають впорядковану трійку чисел (a, b, c) , $a \leq b \leq c$, для якої функція належності $\mu_{\tilde{b}}(x)$ має вигляд:

$$\begin{aligned}\mu_{\tilde{b}}(x) &= (x-a)/(b-a), x \in [a, b], \\ \mu_{\tilde{b}}(x) &= (c-x)/(c-b), x \in [b, c], \\ \mu_{\tilde{b}}(x) &= 0, x \notin [a, c].\end{aligned}\quad (2)$$

Виходячи з традиційних понять та операцій з нечіткими множинами, в існуючих варіантах нечітких баз даних реалізується підтримка виконання нечітких запитів до чітких даних сховища. У випадку нечітких баз знань продукційні правила формулюються на основі реалізації відомих формул нечіткої логіки, а база даних про проблемну область подається у вигляді типового чіткого сховища інформації.

В роботі [5] запропоновано узагальнення поняття нечітких баз даних. В багатьох сучасних інформаційних системах, окрім нечітких запитів, приходить мати справу з неточною, нечіткою інформацією. Це можуть бути дані про результати експериментальних досліджень на основі вимірювань з різними величинами точності (похибками); такими є дані для систем підтримки прийняття рішень, в яких зберігається і ведеться інформація, наприклад, про рівні компетентності експертів, важливість критеріїв, тощо. Нарешті, це можуть бути дані з чітких таблиць БД, що оформлюються у вигляді представлення, яке доповнюється полями величин відповідності значень кожного поля усіх кортежів деяким динамічним критеріям. Наприклад, для запиту про договори можна сформувати таблицю-представлення з полем «сума договору» (A), до якого занести значення міри відповідності суми категорії «приблизно» 900000. В термінах нечітких множин, ці значення є величинами міри належності конкретних числових даних $x, x \in A$ до нечіткої множини $\tilde{Y} = \{(x, \mu_{\tilde{Y}}(x))\}$ з функцією належності $\mu_{\tilde{Y}}(x) \in [0, 1]$ для заданого числового значення суми. Формування нового представлення у цьому випадку можна записати, наприклад, у вигляді послідовності операторів мовою Linq [6], які потім транлюються у відповідну послідовність SQL-запитів.

Іншими словами, для довільної чіткої бази даних може бути побудоване нечітке представлення (нечітка БД, НБД), в якому інформація про характеристики (поля) об'єктів проблемної області подаються парою стовбців: в першому – конкретні значення показника з таблиці чіткої бази даних (вік, показання вимірювального приладу, номер зайнятого місця, значення критерія якості і т.і.), в другому – значення відповідності даних першого стовбця деякому

правилу (нечіткому поняттю). Ця процедура має назву фаззифікації чітко визначених даних.

Зрозуміло, що результат процесу фаззифікації чіткого відношення $R = \{ \langle d_1, d_2, \dots, d_n \rangle \}$, де d_1 - елемент з D_1 , d_2 - елемент з D_2 , ..., d_n - елемент з D_n за i -тим атрибутом, $i = \overline{1, n}$, можна виразити у вигляді R -таблиці. Це нове нечітке відношення

$$\bar{R} = \{ \langle d_1, d_2, \dots, d_i | \mu_{\tilde{A}_i}(d_i), \dots, d_n \rangle \},$$

що формується як множина кортежів з $n+1$ елемента, в яких величини $\mu_{\tilde{A}_i}(d_i)$ задають міру належності значень елементів d_i деякій нечіткій множині $\tilde{A}_i = \{(d, \mu_{\tilde{A}_i}(d)), d \in D_i\}$. Таким чином, список базових та похідних операцій над R -таблицями може бути розширений операцією фаззифікації як різновидом операції розширення.

Потрібно зауважити, що відношення $\bar{R}$, сформоване за i -тим атрибутом, $i = \overline{1, n}$, буде представлятися у вигляді таблиці з p додатковими стовбцями, якщо на i -тий атрибут накладено p нечітких понять. Наприклад, для наведеного вище випадку, крім нечіткої формалізації поняття «приблизно» аналогічно будуватиметься представлення нечіткого поняття «суттєво більше» і т.і. Таким чином, відношення $\bar{R}$ за i -тим атрибутом можна представити у вигляді таблиці з $n+p$ стовбцями

$$\begin{aligned}\bar{R} = \{ \langle d_1, d_2, \dots, d_i | \mu_{\tilde{A}_i^1}(d_i) | \mu_{\tilde{A}_i^2}(d_i) | \\ \dots | \mu_{\tilde{A}_i^p}(d_i), \dots, d_n \rangle \}.\end{aligned}$$

Частина доменів, що не потребує фаззифікації, тобто є чіткими множинами з функцією належності у вигляді характеристичної функції (1), у відношенні $\bar{R}$ може бути представлена у вигляді

$$\begin{aligned}\bar{R} = \{ \langle d_1 | 1, d_2 | 1, \dots, d_i | \mu_{\tilde{A}_i^1}(d_i) | \mu_{\tilde{A}_i^2}(d_i) | \\ \dots | \mu_{\tilde{A}_i^p}(d_i), \dots, d_n | 1 \rangle \}.\end{aligned}$$

Визначення 3. Нечітку множину $\bar{R}$, яка визначає нечітке табличне відношення

$$\begin{aligned}\bar{R} = \{ \langle d_1 | \mu_{\tilde{A}_1^1}(d_1) | \dots | \mu_{\tilde{A}_1^{p_1}}(d_1), \\ d_2 | \mu_{\tilde{A}_2^1}(d_2) | \dots | \mu_{\tilde{A}_2^{p_2}}(d_2), \dots, \\ d_i | \mu_{\tilde{A}_i^1}(d_i) | \dots | \mu_{\tilde{A}_i^{p_i}}(d_i), \dots, \\ d_n | \mu_{\tilde{A}_n^1}(d_n) | \dots | \mu_{\tilde{A}_n^{p_n}}(d_n) \rangle \},\end{aligned}\quad (3)$$

назвемо складеною нечіткою множиною в універсальному просторі $D_1 \cup \dots \cup D_i \cup \dots \cup D_n$.

Визначення 4. [7] Базу даних інформаційної системи будемо називати нечіткою (НБД), якщо для формалізації даних предметної області використовується хоча б одне нечітке відношення $\bar{R}$ (6) у вигляді R -таблиці або R -представлення.

Не обмежуючи загальності, вважатимемо, що у НБД нечітке відношення $\bar{R}$ представлено у вигляді сукупності кортежів $\bar{R} = \{ \langle d_1 | \mu_{\bar{A}_1}(d_1),$

$$d_2 | \mu_{\bar{A}_2}(d_2), \dots, d_i | \mu_{\bar{A}_i}(d_i), \dots, d_n | \mu_{\bar{A}_n}(d_n) \rangle \},$$

$$d_i \in D_i \subset R_+^1, i = \overline{1, n}. \text{ З практичної точки зору}$$

постає важливе питання про формування запитів та реалізацію механізмів отримання даних з НБД.

Для його розв'язання пропонується підхід на основі використання нечітких трикутних чисел для визначення діапазону значень, що реалізує задане нечітке поняття. У наведеному вище випадку відбір договорів з нечітким атрибутом «приблизно» може бути здійснений за допомогою SQL-оператора

Select AgreementID from Agreements
Where Agreement.FirmRegion=1 and
Agreement.Sum between Amin and Amax,

Список використаних джерел

1. *Pascal F.* Understanding relational databases with examples in SQL-92. Wiley & Sons, 1993. 278pp.
2. *Codd E. F.* An evaluation scheme for database management systems that are claimed to be relational // Proc. of second International Conf. on Data Engineering, Los Angeles, February, 1986. – P.720-729.
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 // Tamsui Oxford Journal of Math. Sc. – 2005. – V.21(2). – P.243-268.
5. *Івохін Є.В.* Про підхід до реалізації нечітких баз даних / Є.В. Івохін, К.О.Косинський // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2008. – Вип.2. – С. 83 – 87.
6. *Fabrice Marguerie, Steve Eichert, Jim Wooley.* LINQ in Action. Manning Publ., 2008. 600 p.
7. *Івохін Є.В.* Про нечітке представлення дійсних чисел у формі триплетів// Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2014. – №3. – С.118-121.

де $Amin$ та $Amax$ – мінімальне та максимальне значення інтервалу представлення суми як нечіткого числа. Методика подання деякої величини в умовах невизначеності з допомогою її нечіткого представлення на основі нечітких трикутних чисел та використання спеціальних послідовностей простих чисел запропоновано і детально викладено у [8].

Проведені чисельні експерименти дозволили говорити про конструктивність і ефективність розглянутого способу. Слід також зазначити, що у випадках, коли діапазон представлення не задовольняє користувача, відбір кортежів можна здійснювати на основі суб'єктивного визначення нечіткого трикутного числа.

Наведений підхід до використання нечітко визначених даних на основі формування нечітких представлень і формалізації нечітких операцій вибору за кількісними атрибутами надає можливість створення та обробки слабоформалізованої інформації, визначає спосіб пошуку кортежів нечіткого відношення нечіткої бази даних, які формують результати реалізації SQL-запитів до нечітких даних.

References

1. *PASCAL F.* (1993) *Understanding Relational Databases with Examples in SQL-92.* John Wiley & Sons.
2. *CODD E. F.* (1986) *An Evaluation Scheme for Database Management Systems that are Claimed to be Relational.* Proc. of second International Conference on Data Engineering, Los Angeles. – P.720-729.
3. *ZADEH L.A.* (1965) *Fuzzy sets.* Inf. Contr. – 8. – P.338-353.
4. *BABLU JANA and TAPAN KUMAR ROY.* (2005) *Multi-objective fuzzy linear programming and its application in transportation model.* Tamsui Oxford Journal of Math. Sc. – V.21 (2). – P.243-268.
5. *IVOHIN E. and KOSINSKIY K.* (2008) *About realization of fuzzy databases* // Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Phys.&Math. – 2. – P. 83 – 87.
6. *MARGUERIE F., EICHERT S. and WOOLEY J.* (2008). *LINQ in Action.* Manning Publ.
7. *IVOHIN E.* (2014) *About fuzzy real numbers presentation in triplet form* // Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Phys.&Math. – 3. – P. 118 – 121.

УДК 004.415.52

Картавов М.О., студент,
Панченко Т.В., к.ф.-м.н., доц.,
Поліщук Н.В., студентка

M.O. Kartavov, student,
T.V. Panchenko, PhD, assoc.prof.,
N.V. Polishchuk, student

Доведення тотальної коректності системи Infosoft e-Detailing у IPCL

Infosoft e-Detailing System Total Correctness Proof in IPCL

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, Україна, 01601, місто Київ,
вул. Володимирська, 64/13
e-mail: tp@infosoft.ua

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
64/13, Volodymyrska Street, City of Kyiv, Ukraine,
01601
e-mail: tp@infosoft.ua

Доведення коректності паралельних програм є складною задачею, оскільки стан окремих потоків виконання може змінитись навіть у час їх простою через взаємний вплив один на інший через спільні змінні або механізм повідомлень. Класичні методи типу Флойда-Хоара не застосовні у цьому випадку на пряму і необхідні нові нетривіальні підходи, які враховують це ускладнення. У роботі доведено тотальну коректність комерційної системи Infosoft e-Detailing 1.0 з використанням методу для доведення коректності програм (для визначеного спеціального класу програм – а саме серверного програмного забезпечення в архітектурі Symmetric Multi-Processing як-то сервер баз даних або веб-сервер). Спираючись на дану та інші роботи авторів зроблено висновки щодо адекватності застосування методу для подібних задач завдяки гнучкості композиційно-номінативної платформи та його практичності і легкості застосування для реальних систем.

Ключові слова: тотальна коректність програм, формальна верифікація, liveness property, паралельна програма, interleaving, IPCL, композиційно-номінативні мови.

The correctness proof for programs with parallelism is complicated problem because the state of separate execution thread can be changed even in ready-to-run (waiting) time due to possible inference of one execution path on another via shared data or messaging mechanics. Classical methods like Floyd-Hoare cannot be applied directly in this case and new non-trivial methods are required to cope with such complexity. The total correctness of Infosoft e-Detailing 1.0 commercial system proof using method for software correctness proof (for defined custom class of programs – namely server software for Symmetric Multi-Processing architecture like DB-server or Web-server) is the subject of this article. Operational semantics of the program is defined in terms of state transitions. Conclusions about adequacy of the Method usage for such a kind of tasks (thanks to flexibility of composition-nominative platform) and its practicality as well as ease of use for real-world systems have been made based on this and other authors' works.

Key Words: software total correctness, formal verification, liveness property, concurrent program, interleaving, IPCL, composition-nominative languages.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Буй Д.Б.

Вступ

Верифікація програмних систем – важливе питання у процесі забезпечення якості програмного продукту. Так, ряд стандартів, як міжнародних (наприклад, ISO/IEC 15408), так і галузевих, вимагають формального доведення коректності програми (або її частини, ядра). Зокрема, у згаданій класифікації ISO/IEC 15408 [1], застосування формальних методів вимагається для 3 із 7 визначених рівнів надійності – EAL5-EAL7 (Evaluation Assurance Level).

При цьому формальна верифікація є складнішим підходом для перевірки коректності, ніж методи тестування, але тільки у такий спосіб можна бути переконаним у відсутності помилок. Існуючі формальні методи, окрім очевидних переваг, мають і ряд недоліків: так, деякі з них занадто «теоретизовано» і тому, фактично, відірвано від практичного застосування, а більшість – занадто складні для застосування до реальних задач [2]. Якщо ж метод дозволяє варіювати рівень абстракції, підлаштовуючи його під реальні потреби задачі – доведення можуть

бути значно спрощені, результат досягнений швидше, а іноді – задача переходить у розряд розв’язних. Композиційно-номінативні методи [3] є підходом, який дозволяє обирати потрібний рівень абстракції, зокрема – фіксуючи адекватну систему базових функцій [4].

Особливо складний випадок для доведення коректності програм – конкурентний паралелізм (interleaving concurrency). У класі мов IPCL [2,5] у композиційно-номінативному підході запропоновано метод доведення властивостей програм [6], який надає можливість розв’язати вказану задачу (доведення коректності програм з паралелізмом).

Доведення тотальної коректності у IPCL. Постановка задачі

У даній роботі ми доведемо тотальну коректність програмної системи Infocsoft e-Detailing 1.0. Дана система призначена для (практично) синхронного проведення презентацій одним «лектором» (називається **manager**) з багатьма «слухачами» (називаються **client**). Суть системи зводиться до переключення слайдів на пристрої менеджера і асинхронно-синхронного (тобто майже одночасного, але з затримкою) переключення слайдів після цього на всіх під’єднаних клієнтах. Оскільки продукт є комерційним, ми не наводимо оригінальний вихідний код програмного модуля, але подамо код засобами композиційної мови IPCL для проведення необхідних доведень.

Часткова коректність (safety) доведена у інших роботах авторів. Предметом даної роботи є тотальна коректність (liveness) вказаної програмної системи. Тобто, треба показати, що програма обов’язково зупиняється.

Уточнення задачі

Робота програми складається з циклів: переключення слайду менеджером – переключення всіх клієнтів на потрібний слайд. Кількість таких циклів роботи – необмежена, єдиним критерієм зупинки є «вихід» із презентації – тобто коли всі залишають «презентаційну сесію». Типовий цикл роботи виглядає наступним чином: менеджер надсилає на сервер, а всі клієнти зчитують із сервера, поточний номер слайду (на даний момент – за допомогою технологій HTTP + AJAX + Long Poll) – у такий спосіб досягається асинхронно-синхронне відтворення потрібного слайду на всіх пристроях, підключених до даної презентації (тобто переключення слайду).

Постановка задачі: показати «завершуваність» одного типового циклу переключення. Точніше: якщо менеджер переключив слайд (новий слайд має номер $slideM$) і сповістив про це сервер (S – спільна змінна на сервері, в якій зберігається поточний номер слайду для передачі всім клієнтам, причому спочатку $S \neq slideM$, тобто менеджер-таки здійснив переключення на відмінний від поточного слайд), то згодом всі клієнти завершать свою роботу (при цьому матимуть свій поточний номер слайду для кожного клієнта i : $slideC_i$ такий самий, для кожного клієнта: $\forall i: slideC_i = S = slideM$, – але це питання часткової коректності, яке тут вважатимемо розв’язаним). Всі презентації по замовчанню стартують з першого слайду, тобто на самому початку $slideM = slideC_i = S = 1$.

Програма, семантика та модель виконання

Текст програми на IPCL (розмічених згідно методу) виглядає наступним чином:

```
manager  $\equiv$  [M1] S := slideM [M2]
client  $\equiv$  [C1] newSlide := S;
while [C2] (slideC = newSlide) do
  [C3] newSlide := S;
[C4] slideC := newSlide [C5]
```

Тоді в цілому програмна система буде мати вигляд: **program** = **manager** || **client**ⁿ. Ступінь розуміється у сенсі [2,5,6], тобто паралельне виконання n екземплярів програми **client** у режимі почергового переключення (interleaving) після будь-якого чергового кроку виконання.

Для подання семантики та моделі виконання зафіксуємо стани та задамо переходи відповідної транзиторної системи згідно [2,5,6].

Стан такої програми матиме наступну структуру:

$State = (M, CS, [S \mapsto S_0], [slideM \mapsto SM], CD)$
де: $M \in \{M1, M2\}$ – мітка менеджера,
 $CS = (s_1, \dots, s_n)$ – мітки клієнтів, де:
 n – кількість клієнтів,
 $\forall i (s_i \in \{C1, C2, C3, C4, C5\})$,
 $[S \mapsto S_0]$ – спільне (глобальне) дане,
 $[slideM \mapsto SM]$ – локальне дане менеджера,
 $CD = (d_1, \dots, d_n)$ – локальні дані клієнтів, де:
 $\forall i (d_i = [newSlide \mapsto NS_i, slideC \mapsto SC_i])$,
 $\forall i (\{S_0, SM, NS_i, SC_i\} \subset \mathbb{N})$ – номери слайду.
 $States$ позначатиме множину всіх можливих $State$.

Будемо використовувати стандартну функцію розіменування $A \Rightarrow$ у сенсі композиційно-номінативного підходу [3,4]:

$$A \Rightarrow (d) = w \Leftrightarrow [A \mapsto w] \in d$$

а також позначатимемо $s_i(S) = Pr_i(Pr_2(S))$ та $d_i(S) = Pr_i(Pr_5(S))$ – поточну мітку та дане i -го клієнта (компоненти відповідного вектору).

Транзиційна система буде містити наступні макропереходи (схеми переходів):

$$Transitions = \{ S_1 \rightarrow S_2 \mid S_1, S_2 \in States \wedge (Tr_1(S_1, S_2) \vee Tr_2(S_1, S_2) \vee Tr_3(S_1, S_2) \vee Tr_4(S_1, S_2) \vee Tr_5(S_1, S_2) \vee Tr_6(S_1, S_2)) \}$$

де кожен предикат $Tr_i(S_1, S_2)$ відповідає деякій з атомарних дій програми **program**, які будуть виконані в режимі почергового переключення (interleaving) під час роботи програми, та визначає семантику цієї дії (переходу, транзиції), а саме:

1) для переходу **manager** з мітки **M1** до мітки **M2**:

$$Tr_1(S_1, S_2) = (Pr_1(S_1) = \mathbf{M1}) \wedge (Pr_1(S_2) = \mathbf{M2}) \wedge (Pr_2(S_1) = Pr_2(S_2)) \wedge (Pr_3(S_1) = d) \wedge (Pr_3(S_2) = d \vee [S \mapsto SM]) \wedge (Pr_4(S_1) = Pr_4(S_2) = [slideM \mapsto SM]) \wedge (Pr_5(S_1) = Pr_5(S_2))$$

2) для переходу **client: C1** $\rightarrow$ **C2** (присвоєння перед циклом *while*):

$$Tr_2(S_1, S_2) = (Pr_1(S_1) = Pr_1(S_2)) \wedge (Pr_3(S_1) = Pr_3(S_2) = [S \mapsto S_0]) \wedge (Pr_4(S_1) = Pr_4(S_2)) \wedge \exists j (s_j(S_1) = \mathbf{C1} \wedge s_j(S_2) = \mathbf{C2} \wedge \forall i (i \neq j \rightarrow s_i(S_1) = s_i(S_2) \wedge d_i(S_1) = d_i(S_2)) \wedge (d_j(S_1) = d) \wedge (d_j(S_2) = d \vee [newSlide \mapsto S_0]))$$

3) для переходу **client: C2** $\rightarrow$ **C4** (*false* значення умови циклу *while*):

$$Tr_3(S_1, S_2) = (Pr_1(S_1) = Pr_1(S_2)) \wedge (Pr_3(S_1) = Pr_3(S_2)) \wedge (Pr_4(S_1) = Pr_4(S_2)) \wedge (Pr_5(S_1) = Pr_5(S_2)) \wedge \exists j (s_j(S_1) = \mathbf{C2} \wedge s_j(S_2) = \mathbf{C4} \wedge \forall i (i \neq j \rightarrow s_i(S_1) = s_i(S_2)) \wedge slideC \Rightarrow (d_j(S_1)) \neq newSlide \Rightarrow (d_j(S_1)))$$

4) для переходу **client: C2** $\rightarrow$ **C3** (*true* значення умови циклу *while*):

$$Tr_4(S_1, S_2) = (Pr_1(S_1) = Pr_1(S_2)) \wedge (Pr_3(S_1) = Pr_3(S_2)) \wedge (Pr_4(S_1) = Pr_4(S_2)) \wedge (Pr_5(S_1) = Pr_5(S_2)) \wedge \exists j (s_j(S_1) = \mathbf{C2} \wedge s_j(S_2) = \mathbf{C3} \wedge \forall i (i \neq j \rightarrow s_i(S_1) = s_i(S_2)) \wedge slideC \Rightarrow (d_j(S_1)) = newSlide \Rightarrow (d_j(S_1)))$$

5) для переходу **client: C3** $\rightarrow$ **C2** (присвоєння в тілі циклу *while*):

$$Tr_5(S_1, S_2) = (Pr_1(S_1) = Pr_1(S_2)) \wedge (Pr_3(S_1) = Pr_3(S_2) = [S \mapsto S_0]) \wedge (Pr_4(S_1) = Pr_4(S_2)) \wedge \exists j (s_j(S_1) = \mathbf{C3} \wedge s_j(S_2) = \mathbf{C2} \wedge \forall i (i \neq j \rightarrow s_i(S_1) = s_i(S_2) \wedge d_i(S_1) = d_i(S_2)) \wedge (d_j(S_1) = d) \wedge (d_j(S_2) = d \vee [newSlide \mapsto S_0]))$$

6) для переходу **client: C4** $\rightarrow$ **C5** (присвоєння після циклу *while*):

$$Tr_6(S_1, S_2) = (Pr_1(S_1) = Pr_1(S_2)) \wedge (Pr_3(S_1) = Pr_3(S_2)) \wedge (Pr_4(S_1) = Pr_4(S_2)) \wedge \exists j (s_j(S_1) = \mathbf{C4} \wedge s_j(S_2) = \mathbf{C5} \wedge \forall i (i \neq j \rightarrow s_i(S_1) = s_i(S_2) \wedge d_i(S_1) = d_i(S_2)) \wedge (d_j(S_1) = d) \wedge (d_j(S_2) = d \vee [slideC \mapsto newSlide \Rightarrow (d_j(S_1))]))$$

Початкові стани:

$$StartStates = \{ S \in States \mid Pr_1(S) = \mathbf{M1} \wedge \forall i (s_i(S) = \mathbf{C1}) \}$$

фінальні стани:

$$StopStates = \{ S \in States \mid Pr_1(S) = \mathbf{M2} \wedge \forall i (s_i(S) = \mathbf{C5}) \}$$

Часткову коректність відносно передумови:

$$PreCond(S) = \forall i (slideC \Rightarrow (d_i(S)) = S \Rightarrow (Pr_3(S))) \wedge (slideM \Rightarrow (Pr_4(S)) \neq S \Rightarrow (Pr_3(S)))$$

та післяумови:

$$PostCond(S) = \forall i (slideC \Rightarrow (d_i(S)) = S \Rightarrow (Pr_3(S))) \wedge (slideM \Rightarrow (Pr_4(S)) = S \Rightarrow (Pr_3(S)))$$

було доведено у іншій роботі авторів (подано до друку), тож покажемо тотальну коректність.

Тотальна коректність

Доведемо, що програма **program** = **manager** || **client**ⁿ зупиняється у зафіксованій моделі.

Враховуючи структуру програми, «проблемним» місцем може бути лише цикл. Отже нам потрібно показати, що як тільки менеджер завершить свою роботу ($S := SlideM$), клієнти залишать цикл (тобто не буде нескінченного «зациклювання»).

Покажемо це від супротивного: припустимо, що існує клієнт j такий, що після мітки **C3** потрапляє у мітку **C2** (тобто після виконання тіла циклу $newSlide := S$ переходить до перевірки умови циклування) згідно $Tr_5(S_1, S_2)$ -макропереходу, а наступним його кроком є перехід з **C2** до мітки **C3** (тобто знов вхід у цикл після перевірки умови $slideC = newSlide$) згідно $Tr_4(S_1, S_2)$ -макропереходу.

Оскільки менеджер завершив роботу, значення S більше не зміниться. З цього факту та $PreCond$ випливає, що тепер $slideC \neq S$. З іншого боку, зважаючи на те, що $slideC$ і $newSlide$ – локальні змінні, при переході від **C3** до **C2** значення $slideC$ не зміниться, а $newSlide$ стане рівним S ($newSlide := S$). Тоді для того, щоб j -й клієнт залишився у циклі, при переході потрібно, щоб $slideC = newSlide = S$. Отримали суперечність.

Отже, ми показали, що «зациклювання» – неможливе, а отже всі клієнти завершать роботу (за не більш ніж $4n$ переходів з $Transitions$, де n – кількість клієнтів), що і вимагалось.

Висновки

Разом з іншими результатами (окрім даної роботи) доведено тотальну коректність реальної програмної системи (Infosoft e-Detailing 1.0) у мові IPCL [2,5,6]. Враховуючи всі складнощі процесу подібних доведень [2] у паралельних середовищах, можна констатувати, що метод доведення властивостей програм у IPCL добре пристосований для верифікації паралельних програм, а також – що даний метод дозволяє скоротити доведення за рахунок обрання адекватного задачі рівня абстракції внаслідок універсальності композиційно-номінативного підходу [3,4].

Беручи до уваги гнучкість запропонованого методу і наявність механізму спрощення суджень у деяких випадках [7], а також універсальність підходу [8], можна рекомендувати його для доведень властивостей програм (зокрема, властивостей коректності) для широкого спектру програмного забезпечення, що працює в умовах конкурентного паралелізму (interleaving concisency), у першу чергу – серверного програмного забезпечення.

Список використаних джерел

1. ISO/IEC 15408, Information technology – Security techniques – Evaluation criteria for IT security. – 2005.
2. Панченко Т.В. Композиційні методи специфікації та верифікації програмних систем. Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук.: 01.05.03 / Т.В. Панченко – Київ, 2006. – 177 с.
3. Редько В.Н. Композиции программ и композиционное программирование / В.Н. Редько // Программирование. – 1978. – № 5. – С. 3–24.
4. Nikitchenko N. A Composition Nominative Approach to Program Semantics / N. Nikitchenko. – Technical Report IT-TR: 1998-020. – Technical University of Denmark, 1998. – 103 p.
5. Панченко Т.В. Методологія доведення властивостей програм в композиційних мовах IPCL / Т.В. Панченко // Доповіді Міжнародної конференції “Теоретичні та прикладні аспекти побудови програмних систем” (TAAPSD’2004). – К., 2004. – С. 62–67.
6. Панченко Т.В. Метод доведення властивостей програм в композиційно-номінативних мовах IPCL / Т.В. Панченко // Проблеми програмування. – 2008. – №1. – С. 3–16.

7. Панченко Т.В. Модель спрощеного стану для методу доведення властивостей в мовах IPCL та її застосування і переваги / Т.В. Панченко // Доповіді міжнародної наукової конференції TAAPSD’2007. – Berdyansk, 2007. – С. 319–322.
8. Панченко Т.В. Формалізація видів паралелізму у IPCL / Т.В. Панченко // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: фіз.-мат. науки. – 2008. – вип. 3. – С. 152–157.

References

1. ISO/IEC 15408 (2005) Information technology – Security techniques – Evaluation criteria for IT security.
2. PANCHENKO, T. (2006) *Compositional Methods for Software Systems Specification and Verification* (PhD Thesis). Kyiv. 177 p.
3. REDKO, V. (1978) Compositions of programs and composition programming. *Programming*. 5. pp. 3–24.
4. NIKITCHENKO, N. (1998) *A Composition Nominative Approach to Program Semantics*. Technical Report IT-TR: 1998-020. Technical University of Denmark. 103 p.
5. PANCHENKO, T. (2004) The Methodology for Program Properties Proof in Compositional Languages IPCL. In *Proceedings of the International Conference "Theoretical and Applied Aspects of Program Systems Development" (TAAPSD'2004)*. Kyiv. pp. 62–67.
6. PANCHENKO, T. (2008) The Method for Program Properties Proof in Compositional Nominative Languages IPCL. *Problems of Programming*. 1. pp. 3–16.
7. PANCHENKO, T. (2007) The Simplified State Model for Properties Proof Method in IPCL Languages and its use and advantages. In *Proceedings of the International Conference "Theoretical and Applied Aspects of Program Systems Development" (TAAPSD'2007)*. Berdyansk. pp. 319–322.
8. PANCHENKO, T. (2008) Formalization of Parallelism Forms in IPCL. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physical and Mathematical Sciences*. 3. pp. 152–157.

Надійшла до редколегії 10.09.2015

УДК 004.2:004.5

Коваль Ю.В., асистент

Iu. V. Koval, Assistant

**Протокол багатоточкового потоку:
доведення коректності методом
інерційного моделювання**

**Multipoint stream protocol: proof of
correctness by the insertion programming
method**

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4д,
e-mail: kafedraTK@unicyb.kiev.ua

Taras Shevchenko National University of
Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkov ave., 4d,
e-mail: kafedraTK@unicyb.kiev.ua

В статті побудовано формалізацію агентів та систему правил що утворюють функцію занурення для вказаних агентів що здійснюють передачу повідомлень за протоколом багатоточкового потоку. Розглянуто занурення одного, двох та трьох агентів в середовище комп'ютерної мережі. Наведено результати моделювання поведінок агентів в середовищі за допомогою системи інсерційного програмування IMS. В статті визначено коректність протоколу багатоточкового потоку та наведено доведення коректності.

Ключові слова: протокол багатоточкового потоку, доведення коректності.

Insertion programming system IMS selected to investigate and prove correctness of multipoint stream protocol. Insertion model for transmitter and receiver agents that communicate through multipoint stream protocol presented and analyzed in the article. Syntax of IMS system is selected to present equation system for transmitter and receiver agents and insertion function. Insertion function for transmitter and receiver agents inserted into network environment built and presented in the article. Examples of multipoint stream protocol usage for one, two and three agents in network environment are constructed and investigated. Total amount of visited state presented. In article is shown that minimum transmitter agent velocity is not less then three times than normal transmitter agent velocity. The possibility of transmitter agents blocking checked. The receiver agent behavior investigated and conclusion is made that no one is blocking other. The correctness of multipoint stream protocol defined. Proof of such correctness proposed.

Key Words multipoint stream protocol, proof of correctness.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

1. Вступ та постановка задачі

Сучасні методи програмування все більше і більше використовують підходи, пов'язані з вживанням паралельних обчислень. Паралельно виконуються як частини алгоритмів, так і цілі алгоритми. Задача, що вирішується в такі способи має бути розділеною на підзадачі, а загальне рішення або будується із часткових рішень, або є рішенням одної з паралельних гілок обчислень. Другий випадок, як правило, означає розподіл простору, в якому шукають відповідь, на частини та існування повного рішення в одній з таких частин. Конвексні обчислення (як специфічний випадок паралельних обчислень) дозволяють

готувати значення для обробки наперед (тобто паралельно з обробкою попередніх значень), що також прискорює обчислення в цілому. Всі вказані методи породжують надлишкові обчислення у порівнянні з відповідним базовим алгоритмом, проте кількість цих надлишкових обчислень не повинна бути такою, щоб перекривати вигоду у часі за рахунок розпаралелювання обчислень, інакше втрачається сенс самого підходу розпаралелювання. Де факто, час та кількість роботи для виконання базового алгоритму дорівнює сумі часу та кількості робіт паралельних складових (за виключенням вже вказаної невеликої кількості надлишкових організаційних

обчислень). Такий підхід виправданий за умови обмеженого обчислювального ресурсу, що, власне, і було причиною саме такого підходу до паралельних обчислень. Втім, на сьогодні сумарна кількість обчислювальної потужності у світі така, що завантажити її повністю вже неможливо (згадайте скільки часу ви не використовуєте свій десктоп, ноут(нет,ультра)бук, планшет, смартфон та подібні їм пристрої). Ідеї розподілених (астрономічних) обчислень з використанням комп'ютерів поки їх власники їх не використовують (1,2) безумовно були спрямовані на підвищення відсотку утилізації сумарної обчислювальної потужності, проте і вони не в змозі на сьогодні завантажити всі обчислюючі пристрої. Теза про неможливість 100 відсоткової утилізації обчислювального ресурсу може бути підсилена до тези по неминучість зменшення цього показника щонайменше до 20 відсотків у відповідності до принципу Парето (3). Проте і 20 відсотків утилізації здаються видатним досягненням. З іншого боку, ці твердження співзвучні твердженням про збільшення кількості значень на представлення інформаційної одиниці (4) та відповідно кількості обчислень, що потрібно виконати для обчислення інформаційної одиниці. Як результат таких обставин сформулюємо таку тезу: кількість обчислень при паралельному конкурентному обчисленні результату повинна бути (суттєво) більше кількості обчислень будь якого базового алгоритму для вирішення задачі. Це означає наступне.

Нехай для вирішення деякої задачі існує k алгоритмів. Тоді рішення задачі знаходиться методом паралельного запуску всіх таких алгоритмів та отримання результату від найшвидшого у кожному окремому випадку.

Розглянемо це на прикладі задачі сортування масиву. Існують такі алгоритми:

1. бульбашка
2. вибору
3. шейкерне (сортування трусом)
4. Шела
5. пірамідою
6. швидке

Кожен з алгоритмів має свої переваги та недоліки. Проте жоден з них не отримає результат першим на всіх вхідних значеннях. Тому запуск всіх алгоритмів одночасно дає можливість для кожного набору вхідних значень отримати результат за найкращий час. Такий алгоритм обчислення будемо називати конкурентним алгоритмом.

Для технічної реалізації конкурентного алгоритму потрібно середовище, що здатне одночасно передати значення на обробку багатьом обчислювачам. Серед сучасних систем це є комп'ютерні мережі з технологією broadcast (гучномовність). В (5) запропонований протокол багатоточкового потоку, що виконує поставлену задачу. Із усього сказаного випливає наступна постановка задачі: довести коректність вказаного протоколу.

2. Метод вирішення задачі.

В якості методу вирішення задачі оберемо наступний: формалізувати протокол в термінах інерційного моделювання (6) та довести його коректність методами останнього. Також будемо виконувати вказану методику для окремих спрощених випадків застосування протоколу.

Відповідно до загальної схеми роботи протоколу багатоточкового потоку (4) процес, що передає повідомлення за цим протоколом перебуває в одному з наступних станів: St –початковий, T – надсилання, Js – обробка запиту приєднання, Jt - приєднання отримувача. Процес, що отримує повідомлення за цим протоколом, перебуває в одному з таких станів: Sr –початковий, L – очікування, R – отримування. Подіями, що спостерігаються, та складають поведінку середовища та процесів при реалізації з'єднання за протоколом багатоточкового потоку, є виклики методів з'єднання а також відправка та надходження мережових пакетів. Середовищем, в якому відбуваються події, є мережа передачі та обробки повідомлень. В даному випадку комп'ютерна мережа та комп'ютери, що під'єднані до неї. Відповідно до описаного вище, абеткою подій буде наступна множина: listen, read (connect), read (join), read (data), read (close), write (connect), write (data), write (join), write

(close), TO. Слова read та write позначають дії, що виконують агенти (з відповідним змістом). Слова connect, join, close та data означають повідомлення, якими обмінюються агенти. TO та listen внутрішні дії агентів, що виконуються кожним агентом асинхронно та мають наступний зміст:

- TO – time out – перевищення часу очікування інших подій. Значення часу очікування встановлюється програмістом та залежить від задачі, що вирішується.
- listen – дія, що означає що отримувач готовий приєднатися до багатоточкового потоку.

На малюнку рис. 1 подано графічну схему роботи передавача.

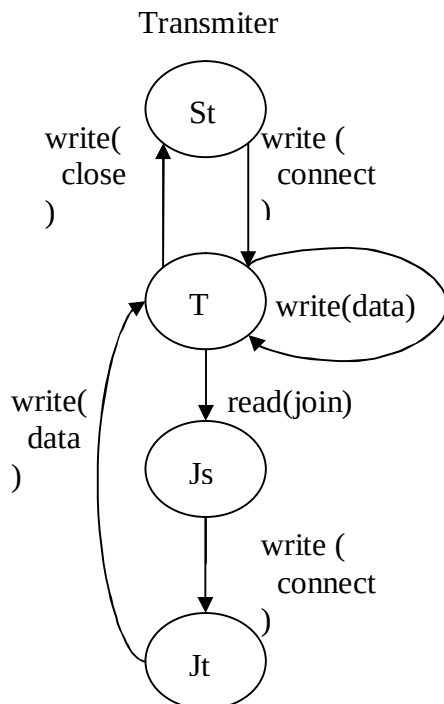


Рис 1. Схема передавача

Передавач одразу знаходяться в стані St який для першого є початковим.

Реалізація абетки зроблена відповідно до наступного сценарію використання протоколу: отримувачі формують окремі точки підключення до потоку та очікують на утворення потоку від передавача. Передавач надсилає повідомлення про створення потоку. Утворюється потік. Передавач надсилає повідомлення. Отримувачі отримують ці повідомлення. Для завершення роботи потоку (якщо таке взагалі

передбачено) передавач надсилає повідомлення close. Передавач та отримувачі закривають з'єднання. У випадку нескінченної інформації передача та прийом в потоці продовжуються до нескінченності.

На малюнку рис. 2 подано графічну схему роботи отримувача.

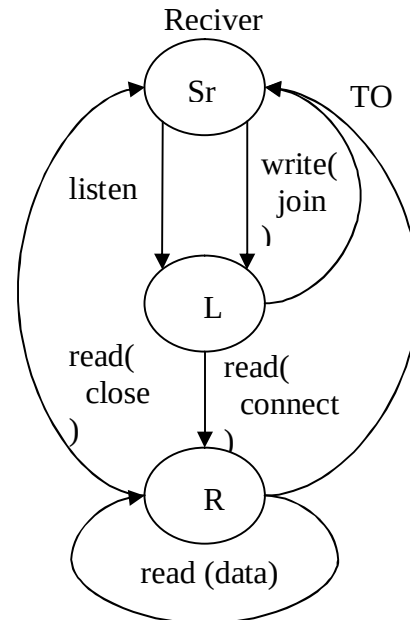


Рис 2. Схема отримувача

Отримувач одразу знаходяться в стані Sr який для першого є початковим.

В термінах інсерційного програмування обидва різновиди процесів іменуються агентами. Агент першого типу (передавач) в одному з'єднанні має бути тільки один. Агентів другого типу (отримувачі) може бути нуль (вироджений випадок) або більше. Середовище, в якому відбуваються всі події, є мережа, що завжди працює, тому вона моделюється агентом Delta. Тоді агенти описується наступними системами рівнянь:

Передавач:

- $St = write(connect).T$
- $T = write(data).T + write(close).St + read(join).Js$
- $Js = write(connect).Jt$
- $Jt = write(data).T$

Отримувач:

- $Sr = listen.L + write(join).L$
- $L = read(connect).R + TO.Sr$
- $R = read(data).R + read(close).Sr + TO.Sr$

Функція занурення у випадку тільки одного передавача задається наступною системою правил:

- $E[\text{write}(\text{connect}).P] \rightarrow \text{write}(\text{connect}).E[P]$
 - $E[\text{write}(\text{data}).P] \rightarrow \text{write}(\text{data}).E[P]$
 - $E[\text{write}(\text{close}).P] \rightarrow \text{write}(\text{close}).E[P]$
- Всі решта переходів є перехід в 0.

Функція занурення у випадку тільки одного отримувача задається наступною системою правил:

- $E[\text{write}(\text{join}).P] \rightarrow \text{write}(\text{join}).E[P]$
- $E[\text{TO}.P] \rightarrow \text{TO}.E[P]$
- $E[\text{listen}.P] \rightarrow \text{listen}.E[P]$

Всі решта переходів є перехід в 0.

Е, Р, а в подальших формулах і Q та R є змінними значеннями яких є стани агентів та середовища. Функція занурення у випадку одного передавача та одного отримувача задається наступною системою правил:

- $E[\text{write}(\text{connect}).P, \text{read}(\text{connect}).Q] \rightarrow \text{transmit}(\text{connect}).E[P, Q]$
- $E[\text{write}(\text{connect}).P, Q] \rightarrow \text{write}(\text{connect}).E[P, Q] \mid Q! = \text{read}(\text{connect}).Q'$
- $E[\text{write}(\text{data}).P, \text{read}(\text{data}).Q] \rightarrow \text{transmit}(\text{data}).E[P, Q]$
- $E[\text{write}(\text{data}).P, Q] \rightarrow \text{write}(\text{data}).E[P, Q] \mid Q! = \text{read}(\text{connect}).Q'$
- $E[\text{write}(\text{close}).P, \text{read}(\text{close}).Q] \rightarrow \text{transmit}(\text{close}).E[P, Q]$
- $E[\text{write}(\text{close}).P, Q] \rightarrow \text{write}(\text{close}).E[P, Q] \mid Q! = \text{read}(\text{connect}).Q'$
- $E[\text{read}(\text{join}).P, \text{write}(\text{join}).Q] \rightarrow \text{transmit}(\text{join}).E[P, Q]$
- $E[P, \text{write}(\text{join}).Q] \rightarrow \text{write}(\text{join}).E[P, Q] \mid P! = \text{read}(\text{join}).P'$
- $E[P, \text{listen}.Q] \rightarrow \text{listen}.E[P, Q]$
- $E[P, \text{TO}.Q] \rightarrow \text{TO}.E[P, Q]$

Всі решта переходів є перехід в 0.

Подія $\text{transmit}(x)$ є одночасна композиція двох дій $\text{read}(x)$ одного агента та $\text{write}(x)$ іншого агента і є скороченням запису $\text{read}(x) > < \text{write}(x)$.

Кожне правило (наприклад перше) може бути переписано у такому вигляді:

$$\frac{P \xrightarrow{\text{write}(\text{connect})} P', Q \xrightarrow{\text{read}(\text{connect})} Q'}{E[P, Q] \xrightarrow{\text{transmit}(\text{connect})} E[P', Q']}$$

Вжитий раніше синтаксис застосовується в системі інсерційного програмування IMS і займає приблизно той самий об'єм тексту. Тому виходячи з наведених міркувань прийнято рішення застосовувати синтаксис системи IMS. Вертикальна риска означає умову за якої правило може бути застосоване.

Функція занурення у випадку одного передавача та двох отримувачів задається наступною системою правил:

- $E[\text{write}(\text{connect}).P, \text{read}(\text{connect}).Q, \text{read}(\text{connect}).R] \rightarrow \text{transmit}(\text{connect}).E[P, Q, R]$
- $E[\text{write}(\text{connect}).P, \text{read}(\text{connect}).Q, R] \rightarrow \text{transmit}(\text{connect}).E[P, Q, R] \mid R! = \text{read}(\text{connect}).R'$
- $E[\text{write}(\text{connect}).P, Q, \text{read}(\text{connect}).R] \rightarrow \text{transmit}(\text{connect}).E[P, Q, R] \mid Q! = \text{read}(\text{connect}).Q'$
- $E[\text{write}(\text{connect}).P, Q, R] \rightarrow \text{write}(\text{connect}).E[P, Q, R] \mid Q! = \text{read}(\text{connect}).Q' \ \& \ R! = \text{read}(\text{connect}).R'$
- $E[\text{write}(\text{data}).P, \text{read}(\text{data}).Q, \text{read}(\text{data}).R] \rightarrow \text{transmit}(\text{data}).E[P, Q, R]$
- $E[\text{write}(\text{data}).P, \text{read}(\text{data}).Q, R] \rightarrow \text{transmit}(\text{data}).E[P, Q, R] \mid R! = \text{read}(\text{data}).R'$
- $E[\text{write}(\text{data}).P, Q, \text{read}(\text{data}).R] \rightarrow \text{transmit}(\text{data}).E[P, Q, R] \mid Q! = \text{read}(\text{data}).Q'$
- $E[\text{write}(\text{data}).P, Q, R] \rightarrow \text{write}(\text{data}).E[P, Q, R] \mid Q! = \text{read}(\text{data}).Q' \ \& \ R! = \text{read}(\text{data}).R'$
- $E[\text{write}(\text{close}).P, \text{read}(\text{close}).Q, \text{read}(\text{close}).R] \rightarrow \text{transmit}(\text{close}).E[P, Q, R]$
- $E[\text{write}(\text{close}).P, \text{read}(\text{close}).Q, R] \rightarrow \text{transmit}(\text{close}).E[P, Q, R] \mid R! = \text{read}(\text{close}).R'$
- $E[\text{write}(\text{close}).P, Q, \text{read}(\text{close}).R] \rightarrow \text{transmit}(\text{close}).E[P, Q, R] \mid Q! = \text{read}(\text{close}).Q'$
- $E[\text{write}(\text{close}).P, Q, R] \rightarrow \text{write}(\text{close}).E[P, Q, R]$

- Q!=read(connect).Q' &
R!=read(close).R'
- E[read(join).P,write(join).Q, write(join).R]
->1:transmit(join).E[P,Q, write(join).R]+
2:transmit(join).E[P, write(join).Q,R]
- E[read(join).P,write(join).Q,R]
->1:transmit(join).E[P,Q,R]
- E[read(join).P,Q,write(join).R]
->2:transmit(join).E[P,Q,R]
- E[P,write(join).Q,R]
->1:write(join).E[P,Q,R] |
P!=read(join).P'
- E[P,Q,write(join).R]
->2:write(join).E[P,Q,R] |
P!=read(join).P'
- E[P,listen.Q,listen.R]->listen.E[P,Q,R]
- E[P,listen.Q,R]->listen.E[P,Q,R]
- E[P,Q,listen.R]->listen.E[P,Q,R]
- E[P,TO.Q,TO.R]->TO.E[P,Q,R]
- E[P,TO.Q,R]->TO.E[P,Q,R]
- E[P,Q,TO.R]->TO.E[P,Q,R]

Всі решта переходів є перехід в 0.

У випадку передачі повідомлень з передавача, вони зчитуються отримувачами одночасно. Це підтримано на рівні мережевого середовища та описується одночасною композицією. Тому transmit(connect) в першому правилі є скороченням для такого запису: write(connect) >< (1:read(connect), 2:read(connect)). Так само в правилах подібних до першого. В другому правилі та подібних до нього зберігається попереднє пояснення для дії transmit(x).

Передача запитів на приєднання до потоку отримувачами здійснюється по черзі. Мережеве середовище на базовому рівні забезпечує послдовність (не одночасність) передачі. Окрім того всі повідомлення зберігаються в черзі та обробляються. В описі таких дій вказується, який агент виконав цю дію. Мітки 1 та 2 використовуються саме для цього. Всі агенти отримувачі, що знаходяться в стані L одночасно отримують повідомлення connect та переходять до стану R зчитування потоку.

Дії listen випадково можуть відбутися одночасно, проте оскільки це внутрішні дії кожного агента отримувача, то немає

потреби розрізняти їх на рівні середовища. Те саме стосується дій TO. Обидві дії не впливають на працездатність агенту передавача та всієї системи агентів в цілому.

Причина, з якої агент передавач міг би перестати передавати повідомлення полягає в можливості виконання необмеженої кількості запитів приєднання (join) до потоку. Для запобігання такої можливості кожна обробка запиту приєднання супроводжується передачею щонайменше одного повідомлення значень.

Доведення останнього твердження полягає в аналіз слів, що є поведінками агента передавача. Кожне таке слово, в якому зустрічається підслово read (join) . write (connect) має наступним символом write (data). Таким чином, можемо підсумувати наступне: у випадку необмеженої кількості запитів на приєднання агент передавач матиме продуктивність не гірше ніж в три рази менше, порівняно з безперешодною роботою.

Всі наведені системи правил були перевірені за допомогою системи IMS. Для перших двох систем правил система IMS визначила, що використовуються лише по два стани з усіх можливих. В результаті обробки третьої системи правил, що задає функцію занурення для одного передавача та одного отримувача, було досліджено вже 26 станів середовища. Всі стани визначено як досяжні. Всі стани визначено як покриті.

При обробці четвертої системи правил, що задає функцію занурення для одного передавача та двох отримувачів, кількість досліджених станів середовища сягнула 226. Процес дослідження зайняв приблизно одну хвилину машинного часу комп'ютера з процесором i3. Всі стани визначено як досяжні. Всі стани визначено як покриті.

Дослідження систем з кількістю отримувачів більше двох не змінює досяжність та покриття станів середовища, незважаючи на зростання їх кількості. Окрім того, враховуючи що отримувачі утворюють віртуальний процес, завжди можемо звести задачу з кількома (більше двох) отримувачів до задачі з двома отримувачами.

Досліджені системи дозволяють зробити висновок про коректність протоколу багатоточкового потоку. По-перше, агент передавач завжди може передати потік. По-друге агент отримувач завжди може приєднатися до потоку та отримати значення з нього. По-третє агенти отримувачі не блокують один одного при приєднанні до потоку. По-четверте, у разі непередбачуваної зупинки процесу передавача процеси отримувачі завершуються в разі потреби. Завершення агента передавача залежить лише від внутрішньої коректності самого агента.

Вказані чотири властивості визначають коректність протоколу багатоточкового потоку.

Список використаних джерел

1. List of distributed computing projects / Wikipedia, the free encyclopedia – Режим доступу: https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_distributed_computing_projects (14.09.2015)
2. Berkeley Open Infrastructure for Network Computing / BIONIC – Режим доступу: <https://boinc.berkeley.edu/> (14.09.2015)
3. Pareto principle / Wikipedia, the free encyclopedia – Режим доступу: https://en.wikipedia.org/wiki/Pareto_principle (14.09.2015)
4. Крак Ю.В. До розробки інтерактивного інтерфейсу моделювання та розпізнавання жестової інформації / Ю.В. Крак, Ю.В. Коваль, А.С. Тернов // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка Серія фізико-математичні науки. – 2014. – №4. – С.175-178.
5. Коваль Ю.В. Протокол багатоточкового потоку: означення та застосування в створенні механізмів розпаралелювача та аналізатора подій в системі жестового інтерфейсу / Ю.В. Коваль // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка Серія фізико-математичні науки. – 2015. – №2. – С.152-155.
6. Летичевский А.А. Инсерционное моделирование / А.А. Летичевский // УСиМ – 2012. – №6. – С.3-14.

3. Висновки та подальші напрямки роботи.

В результаті проведених досліджень була розроблена та досліджена інерційна модель агентів передавача та отримувача в мережевому середовищі що виконують комунікацію за допомогою протоколу багатоточкового потоку. Визначено та доведено коректність протоколу багатоточкового потоку.

Подальші дослідження будуть спрямовані на те, щоб реалізувати запропонований протокол, дослідити практичну реалізацію, реалізувати на його основі модулі розпаралелювача та аналізатора подій системи розпізнавання жестів та жестової мови та дослідити роботу останньої.

References

1. List of distributed computing projects / Wikipedia, the free encyclopedia – Режим доступу: https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_distributed_computing_projects (14.09.2015)
2. Berkeley Open Infrastructure for Network Computing / BIONIC – Режим доступу: <https://boinc.berkeley.edu/> (14.09.2015)
3. Pareto principle / Wikipedia, the free encyclopedia – Режим доступу: https://en.wikipedia.org/wiki/Pareto_principle (14.09.2015)
4. KRAK IU.V., KOVAL IU.V., TERNOV A.S. (2014) *To creation of interactive interface for sign information modeling and recognition*. Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Physics & Mathematics. Vol. 4. p.175-178.
5. KOVAL IU.V. (2015) *Virtual process: definition and application for gestures interface system creation*. Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Physics & Mathematics. Vol. 2. p.152-155.
6. LETICHEVSKY A.A. (2012) *Insertion modeling*. CSaM Vol. 6. p.3-14.

Надійшла до редколегії 15.9.2015

УДК 519.876:51-7:612.017

Колянова Т.В., к.ф.-м. н.

T.V. Kolianova, PhD assistant

Модифікована математична модель, що описує взаємодію антигенів та антитіл в організмі людини

Modified mathematical model that describes the interaction antigens and antibodies in the human body

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,

e-mail: tania.kolianova@gmail.com

e-mail: tania.kolianova@gmail.com

Розглядається модифікована математична модель, що описує взаємодію антигенів та антитіл в організмі людини. Врахувавши інформацію про те, що параметр запізнення τ виражається в годинах і в порівнянні з добами та тижнями, коли відбувається динамічний процес захворювання та лікування, є малим параметром. Це дало підстави вважати параметр τ в системі інфекційного захворювання Г.І. Марчука малим параметром. Цей факт було використано для вибору метода дослідження вихідної системи. Запропонований метод був названий методом лінеаризації по параметру τ системи диференціальних рівнянь із запізненням.

Для запропонованої модифікованої системи інфекційного захворювання при мінімальних вимогах до гладкості шуканих розв'язків (такі вимоги полягають в припущенні існування обмежених перших похідних) було досліджено нетривіальний розв'язок та показано ідентичність результатів дослідження запропонованої модифікованої системи з системою рівнянь інфекційного захворювання Г.І. Марчука.

Ключові слова: система диференціальних рівнянь, запізнення, антиген, антитіло, стаціонарний розв'язок.

We consider a modified mathematical model that describes the interaction of antigens and antibodies in humans. Taking into account information that the delay parameter τ expressed in hours and compared to days or weeks when there is a dynamic process and treatment of disease, there is a small parameter. This gave reason to believe parameter τ in the system of infectious disease by G.I. Marchuk like small parameter. This fact was used to select the method of research output system. The proposed method was named method of linearization by the parameter τ for differential equations with delay.

For the proposed modified system of infectious disease (describes by system of differential equations) with minimal requirements of smoothness desired solutions (such requirements is to assume the existence of bounded first derivatives) was investigated trivial solution and identity research results show the proposed modified system of equations infectious disease by G.I. Marchuk.

Key words: system of differential equations, delay, antigen, antibody, stationary solution.

Статтю представив д. т. н., с. н. с. Кудін В.І.

Нелінійна система звичайних диференціальних рівнянь, що описує модифіковану математичну модель захворювання [1] має вигляд (1), де $V(t)$ – концентрація патогенних антигенів, що розмножуються; $F(t)$ – концентрація антитіл (під антитілами

розуміють субстрати імунної системи, що нейтралізують антигени); $C(t)$ – концентрація плазматичних клітин (популяція носіїв та продуцентів антитіл); $m(t)$ – відносна характеристика ураження органу; τ – малий параметр,

$$\begin{aligned}\frac{dV}{dt} &= (\beta - \gamma F)V, \\ \frac{dF}{dt} &= \rho C - (\mu_F + \eta\gamma V)F, \\ \frac{dC}{dt} &= \xi(m)\alpha[VF + \tau V(\mu_F + \eta\gamma V - \beta + \gamma F) - \rho C] - \\ &\quad - \mu_C(C - C^*), \\ \frac{dm}{dt} &= \sigma V - \mu_m m.\end{aligned}\quad (1)$$

Початкові умови

$$\begin{aligned}V(t_0) &= V_0, \quad C(t_0) = C_0, \\ F(t_0) &= F_0, \quad m(t_0) = m_0.\end{aligned}\quad (2)$$

Проводимо дослідження на стійкість стаціонарної точки, що описує стан хронічної хвороби [1], ввівши наступну заміну змінних

$$\begin{aligned}V &= V_2 + \tilde{V}, \quad F = F_2 + \tilde{F}, \\ C &= C_2 + \tilde{C}, \quad m = m_2 + \tilde{m},\end{aligned}$$

де $\tilde{V}$, $\tilde{F}$, $\tilde{C}$, $\tilde{m}$ – нові збурені змінні.

Вважаючи збурені змінні малими, лінеаризуємо систему рівнянь (1) в околі точки нетривіальної точки []:

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{V}}{dt} &= (\beta - \gamma F_2)\tilde{V} - \gamma V_2\tilde{F} = (\beta - \gamma \frac{\beta}{\gamma})\tilde{V} - \gamma V_2\tilde{F} = -\gamma V_2\tilde{F}, \\ \frac{d\tilde{F}}{dt} &= -\eta\gamma F_2\tilde{V} - (\mu_F + \eta\gamma V_2)\tilde{F} - \rho\tilde{C} = \\ &= -\eta\gamma \frac{\beta}{\gamma}\tilde{V} - (\mu_F + \eta\gamma V_2)\tilde{F} - \rho\tilde{C} = \\ &= -\eta\beta\tilde{V} - (\mu_F + \eta\gamma V_2)\tilde{F} - \rho\tilde{C}, \\ \frac{d\tilde{C}}{dt} &= (\alpha F_2 + \alpha\mu_F F_2 + 2\alpha\eta\gamma V_2 F_2 - \alpha\beta F_2 + \alpha\gamma F_2^2 - \\ &\quad - \alpha\rho C_2)\tilde{V} + (\alpha V_2 + \alpha\mu_F V_2 + \alpha\eta\gamma V_2^2 - \alpha\beta V_2 + \\ &\quad + 2\alpha\gamma V_2 F_2)\tilde{F} - (\alpha\rho V_2 + \mu_C)\tilde{C} =\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&= (\alpha \frac{\beta}{\gamma} + \alpha\mu_F \frac{\beta}{\gamma} + 2\alpha\eta\gamma V_2 \frac{\beta}{\gamma} - \alpha\beta \frac{\beta}{\gamma} + \alpha\gamma \frac{\beta^2}{\gamma^2} - \\ &\quad - \alpha\rho C_2)\tilde{V} + (\alpha V_2 + \alpha\mu_F V_2 + \alpha\eta\gamma V_2^2 - \alpha\beta V_2 + \\ &\quad + 2\alpha\gamma V_2 F_2)\tilde{F} - (\alpha\rho V_2 + \mu_C)\tilde{C} = \\ &= (\alpha \frac{\beta}{\gamma} + \alpha\mu_F \frac{\beta}{\gamma} + 2\alpha\beta\eta V_2 - \alpha \frac{\beta^2}{\gamma} + \alpha \frac{\beta^2}{\gamma} - \alpha\rho C_2)\tilde{V} + \\ &\quad + (\alpha V_2 + \alpha\mu_F V_2 + \alpha\eta\gamma V_2^2 - \alpha\beta V_2 + 2\alpha\beta V_2)\tilde{F} - \\ &\quad - (\alpha\rho V_2 + \mu_C)\tilde{C} = (\alpha \frac{\beta}{\gamma} + \alpha\mu_F \frac{\beta}{\gamma} + 2\alpha\beta\eta V_2 - \alpha\rho C_2)\tilde{V} + \\ &\quad + (\alpha V_2 + \alpha\mu_F V_2 + \alpha\eta\gamma V_2^2 + \alpha\beta V_2)\tilde{F} - (\alpha\rho V_2 + \mu_C)\tilde{C},\end{aligned}$$

Згадаємо, що $\mu_F + \eta\gamma V_2 = \frac{\gamma\rho}{\beta}C_2$. Підставимо у формулу, представлену вище, та отримаємо

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{C}}{dt} &= (\alpha \frac{\beta}{\gamma} + \alpha \frac{\beta}{\gamma} (\mu_F + \eta\gamma V_2) + \alpha\beta\eta V_2 - \alpha\rho C_2)\tilde{V} + \\ &= (\alpha V_2 + \alpha V_2 (\mu_F + \eta\gamma V_2) + \alpha\beta\eta V_2)\tilde{F} - (\alpha\rho V_2 + \mu_C)\tilde{C} = \\ &= (\alpha \frac{\beta}{\gamma} + \cancel{\alpha \frac{\beta}{\gamma} \frac{\gamma\rho}{\beta} C_2} + \alpha\beta\eta V_2 - \cancel{\alpha\rho C_2})\tilde{V} + \\ &\quad + (\alpha V_2 + \alpha V_2 \frac{\gamma\rho}{\beta} C_2 + \alpha\beta\eta V_2)\tilde{F} - (\alpha\rho V_2 + \mu_C)\tilde{C}\end{aligned}$$

Отже,

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{C}}{dt} &= (\alpha \frac{\beta}{\gamma} + \alpha\beta\eta V_2)\tilde{V} + (\alpha V_2 + \alpha V_2 \frac{\gamma\rho}{\beta} C_2 + \alpha\beta\eta V_2)\tilde{F} - \\ &\quad - (\alpha\rho V_2 + \mu_C)\tilde{C}, \\ \frac{d\tilde{m}}{dt} &= \sigma\tilde{V} - \mu_m \tilde{m}.\end{aligned}$$

Отримаємо систему лінеаризованих диференціальних рівнянь в нових змінних-збуреннях [2, 4]:

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{V}}{dt} &= -\gamma V_2 \tilde{F}, \\ \frac{d\tilde{F}}{dt} &= -\eta \beta \tilde{V} - \frac{\gamma}{\beta} \rho C_2 \tilde{F} + \rho \tilde{C} \\ \frac{d\tilde{C}}{dt} &= \left(\alpha \frac{\beta}{\gamma} + \tau \alpha \beta \eta V_2\right) \tilde{V} + \\ &+ (\alpha V_2 + \tau \alpha V_2 \frac{\gamma \rho}{\beta} C_2 + \tau \alpha \beta V_2) \tilde{F} - (\tau \alpha \rho V_2 + \mu_C) \tilde{C}, \\ \frac{d\tilde{m}}{dt} &= \sigma \tilde{V} - \mu_m \tilde{m}.\end{aligned}\quad (3)$$

Запишемо матрицю коефіцієнтів при лінійних членах відносно малих збурень $\tilde{V}$, $\tilde{F}$, $\tilde{C}$ та $\tilde{m}$:

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma V_2 & 0 & 0 \\ -\eta \beta & -\frac{\gamma}{\beta} \rho C_2 & \rho & 0 \\ \alpha \frac{\beta}{\gamma} + \tau \alpha \beta \eta V_2 & \alpha V_2 + \tau \alpha V_2 \frac{\gamma \rho}{\beta} C_2 + \tau \alpha \beta V_2 & -(\mu_C + \tau \alpha \rho V_2) & 0 \\ \sigma & 0 & 0 & -\mu_m \end{pmatrix}$$

Характеристичне рівняння для системи рівнянь (3) матиме вигляд:

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -\gamma V_2 & 0 & 0 \\ -\eta \beta & -\frac{\gamma}{\beta} \rho C_2 - \lambda & \rho & 0 \\ \alpha \frac{\beta}{\gamma} + \tau \alpha \beta \eta V_2 & \alpha V_2 + \tau \alpha V_2 \frac{\gamma \rho}{\beta} C_2 + \tau \alpha \beta V_2 & -(\mu_C + \tau \alpha \rho V_2) - \lambda & 0 \\ \sigma & 0 & 0 & -\mu_m - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Отже,

$$(-\mu_m - \lambda) \times \begin{vmatrix} -\lambda & -\gamma V_2 & 0 \\ -\eta \beta & -\frac{\gamma}{\beta} \rho C_2 - \lambda & \rho \\ \alpha \frac{\beta}{\gamma} + \tau \alpha \beta \eta V_2 & \alpha V_2 + \tau \alpha V_2 \frac{\gamma \rho}{\beta} C_2 + \tau \alpha \beta V_2 & -(\mu_C + \tau \alpha \rho V_2) - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

Звідси маємо, що перший корінь
 $\lambda_1 = -\mu_m$.

Дослідимо допоміжне рівняння

$$Z(\lambda) = \begin{vmatrix} -\lambda & -\gamma V_2 & 0 \\ -\eta \beta & -\frac{\gamma}{\beta} \rho C_2 - \lambda & \rho \\ \alpha \frac{\beta}{\gamma} + \tau \alpha \beta \eta V_2 & \alpha V_2 + \tau \alpha V_2 \frac{\gamma \rho}{\beta} C_2 + \tau \alpha \beta V_2 & -(\mu_C + \tau \alpha \rho V_2) - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Маємо

$$\begin{aligned}Z(\lambda) &= -\lambda^3 - \lambda^2 (\mu_F + \eta \gamma V_2 + \mu_C + \tau \alpha \rho V_2) - \\ &- \lambda (\mu_F \mu_C + \eta \gamma V_2 \mu_C - \rho \alpha V_2 - \tau \alpha \beta \rho V_2 - \eta \gamma \beta V_2) - \\ &- \alpha \beta \rho V_2 + \mu_C \eta \gamma \beta V_2 = 0.\end{aligned}$$

Характеристичне рівняння $Z(\lambda)$ матиме вигляд:

$$\lambda^3 + \lambda^2 \left(\frac{\gamma}{\beta} \rho C_2 + \mu_C + \tau \alpha \rho V_2 \right) + \lambda \left(\frac{\gamma}{\beta} \rho \mu_C C_2 - \alpha \rho V_2 - \tau \alpha \rho \beta V_2 - \eta \gamma \beta V_2 \right) + (\alpha \rho \beta V_2 - \eta \gamma \beta \mu_C V_2) = 0. \quad (4)$$

Кубічний багаточлен Г.І. Марчука, що побудований на основі використання гармонійного аналізу для дослідження стаціонарного стану, що описує хронічне захворювання, має вигляд [3]:

$$\begin{aligned}Z_M(\lambda) &= -\lambda^3 - a\lambda^2 - b\lambda + d + (g\lambda - f)e^{-\tau\lambda}, \\ \text{де} \quad a &= \mu_F + \eta \gamma V_2 + \mu_C, \\ b &= \mu_C (\eta \gamma V_2 + \mu_F) - \eta \gamma \beta V_2, \\ d &= \mu_C \eta \gamma \beta V_2, \\ g &= \alpha \rho V_2, \\ f &= \alpha \rho \beta V_2.\end{aligned}$$

Якщо у $Z_M(\lambda)$ вважати час запізнення τ малим і при цьому скористатись лінійним наближенням $e^{-\tau\lambda} = 1 - \tau\lambda$, то в результаті отримаємо

$$\begin{aligned}Z_M(\lambda) &= -\lambda^3 - a\lambda^2 - b\lambda + d + (g\lambda - f)(1 - \tau\lambda) = \\ &= -\lambda^3 - a\lambda^2 - b\lambda + d + g\lambda - f - \tau g\lambda^2 + \lambda\tau f = \\ &= -\lambda^3 - \lambda^2(a + \tau g) - \lambda(b - g - \tau f) + d - f.\end{aligned}$$

Якщо порівняти між собою представлений лінеаризований кубічний багаточлен Г.І. Марчука $Z_M(\lambda)$ та побудований нами кубічний багаточлен $Z(\lambda)$, що представлений формулою (4), то побачимо, що вони збігаються. Це говорить про адекватність вибраного нами методу лінеаризації.

При цьому відмітимо, що у дослідженнях Г.І. Марчука вимагається нескінченно-диференційованість відповідних функцій в моделі інфекційного захворювання. В той же час в нашій модифікації задачі, враховуючи специфіку біологічних моделей, де забезпечується лише диференційованість

першого порядку, подальша гладкість для функцій моделі не вимагається. Така біологічна специфіка, зокрема, не дозволяє використовувати навіть розклад до τ^2 включно. В цьому як раз і відмінність запропонованого нашого підходу лінеаризації функцій для дослідження стійкості стаціонарних точок математичної моделі інфекційного захворювання від досліджень Г.І. Марчука на основі гармонійного аналізу. Додатково треба відзначити, що в роботах Г.І. Марчука та його школи лінеаризований випадок зовсім не розглядається.

Список використаних джерел

1. Колянова Т.В. Про вплив запізнення в моделі Г.І. Марчука / Колянова Т.В., Ляшенко І.М. / XIX International Conference. Problems of Decision Making under Uncertainties (PDMU-2012). Abstracts, Mukachevo, Ukraine, April 23-27, 2012. С.153-157.
2. Хайпер Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи / Хайпер Э., Нёрсет С., Ваннер Г. – Москва: Мир. – 1990.
3. Марчук Г.И. Математические модели в иммунологии. Вычислительные методы и эксперименты. – Изд.3-е, перераб. и. доп. / Марчук Г.И. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1991. – 304с.
4. Понтрягин Л.С. Обыкновенные дифференциальные уравнения / Л.С.Понтрягин. – Москва: Наука. – 1974. – 332 с.

References

1. KOLIANOVA T.V., LYASHENKO I.M. (2012) Pro vplyv zapiznennia v modeli G.I. Marchuka. XIX International Conference. Problems of Decision Making under Uncertainties (PDMU-2012). Abstracts, Mukachevo, Ukraine, April 23-27, С.153-157.
2. KHAYRER E., NERSET P., VANNER G. (1990) Reshenie obyknovennyh differencialnyh uravneniy. Nezhestkie zadachi. Moskva: Mir.
3. MARCHUK G.I. (1991) Matematicheskie modeli v immunologii. Vychislitelnye metody I eksperimenty. – Izd.3-e, perrab. i dop. M.: Nauka. Gl. red. fiz.-mat. lit.
4. PONTRYAGIN L.S. (1974) Obyknovennye differencialnye uravneniya. Moskva: Nauka.

Надійшла до редколегії 11.09.15

УДК 519.8

Лавер В.О., викладач

V.O. Laver, teacher

Нечіткі узагальнення класичних методів розподілу

Fuzzy generalization of classical rationing methods

Ужгородський національний університет,
Університетська вул., 14, м. Ужгород,
Закарпатська область, 88000.
E-mail: v.laver@gmail.com

Uzhgorod National University, Universitetska str.
14, Uzhgorod, Transcarpathian region, 88000.
E-mail: v.laver@gmail.com

В статті розглядається застосування теорії нечітких множин до класичної задачі розподілу витрат. Пропонуються узагальнення класичних методів розподілу, які базуються на арифметичних операціях над нечіткими числами. Розглядаються також нечіткі узагальнення індексів нерівності Джині, Тейла та Аткінсона.

Ключові слова: розподіл витрат, нечіткі моделі і методи, методи розподілу, задачі банкрутства та оподаткування, індекси нерівності.

Different rationing problems are emerging in almost all spheres of human activity. On the other hand, the input data is often very uncertain, so the generalization of the rationing methods on the case of uncertain data are very important. In this article, the application of the fuzzy sets theory to the classical rationing problem is considered. New generalizations of classical rationing methods (uniform gains, uniform losses, proportional method, Talmudic method, reverse Talmudic method and the Pinile's rule) are proposed. These generalizations are based on the fuzzy arithmetic, comparison of the fuzzy numbers is made by comparing the corresponding expected values, so the "crisp" model can be considered just as a particular case of the fuzzy one. Applications of these generalizations are illustrated by a numerical example. In addition, the corresponding generalizations of some inequality measures are proposed (Gini index, Theil and Atkinson indices). The resulting measures are presented as trapezoidal fuzzy numbers.

Key Words: rationing, fuzzy sets, rationing methods, bankruptcy problems, taxation.

Статтю представив д.т.н. проф. Волошин О.Ф.

Вступ

Однією із важливих проблем, потреба у вирішенні якої виникає практично у всіх сферах практичної діяльності людини, є задача розподілу в умовах обмеженості ресурсів [1]. Актуальність дослідження тем розподілу і пов'язаних з ними проблем нерівності та поляризації є надзвичайно високою. Про це свідчить, зокрема, велика кількість нобелівських лауреатів з економіки, які присвятили свої дослідження саме цим явищам. Так. У 2015 році Нобелівську премію отримав Ангус Дітон, за дослідження споживання, бідності та добробуту.

Дослідження проблем розподілу почалося ще у середньовічній талмудичній літературі. В другій половині двадцятого сторіччя даними задачами зацікавились і вчені-математики - Баррі О'Ніл, Роберт Ауман, Міхаель Машлер, Пейтон Янг та ін.. Серед сучасних вчених, котрі займаються цією проблематикою, слід згадати Ерве Мулена [2], Вільяма Томсона [3], котрі є авторами оглядів по даній тематиці.

Актуальним є питання розширення класичних моделей та методів розподілу на випадок невизначеності. Так, в [4] для моделювання невизначеності застосовується інтервальна арифметика. В даній роботі пропонується застосування апарату теорії нечітких множин [5] для узагальнення класичної задачі розподілу. Ця робота є продовженням досліджень, опублікованих в [6,7].

Постановка задачі розподілу

Нехай $N = \{1, \dots, n\}$ - множина агентів. Кожен агент $i \in N$ дає заявку $b_i \in R_+$ на деяке благо $c \in R_+$. Кількості блага недостатньо, щоб задовільнити всі заявки. Задачею розподілу називається задача пошуку вектора $x \in R^N$ для заданої пари $(b, c) \in R_+^N \times R_+$ з умовою $\sum b_i \geq c$, який задовольняє таким умовам:

1. невід'ємності ($x_i \geq 0, \forall i \in N$);
2. обмеженості ($x_i \leq b_i, \forall i \in N$);
3. збалансованості ($\sum x_i = c$).

Вектор $x \in R^N$ при цьому називається вектором винагород. Множина всіх задач розподілу позначається C^N .

Правило (метод) розподілу визначається співвідношенням, що ставить у відповідність кожній множині агентів N і кожній парі (b, c) єдиний вектор винагород, який позначатимемо $r(N, c, b)$.

Основні методи розподілу

Розглянемо довільну задачу розподілу $(b, c) \in C^N$.

За пропорційним методом [3] (пропорційним податком [1], позначатимемо Pr) для кожного $i \in N$ винагорода i -го агента становить λb_i . Параметр λ (який визначає пропорційну частку i -го агента) для даного методу вибирається так, щоб сума винагород становила c .

Для методу обмеженого вирівнювання винагород (подушного податку [1], позначатимемо CEA), винагорода i -го агента шукається так: фіксуємо заявки агентів і поступово збільшуємо розмір блага, яке потрібно розподілити від 0 до $\sum b_i$; спершу винагороди діляться порівну, поки кожен агент не отримає винагороду, рівну найменшій заявці; агент із найменшою заявкою вибуває і надалі винагороди діляться порівну між агентами, що залишились, поки не буде задоволено другу найменшу заявку і т.д.

Для методу обмеженого вирівнювання втрат (рівневого податку [1], позначатимемо CEL) винагороди агентів визначатимуться шляхом, симетричним до вищенаведеного. Нехай кількість блага, яке необхідно розподілити, поступово зменшується від $\sum b_i$ до 0. Вирівнювання втрат на початку застосовується до всіх агентів, поки їхня загальна втрата не стане рівною найменшій заявці. Агент із найменшою заявкою отримує 0 і вибуває із розподілу. Процес продовжується, доки сукупна втрата не стане рівною другій найменшій заявці, тоді відповідний агент вибуває із розподілу і т.д.

Талмудичний метод [3] (позначатимемо T) може розглядатись як поєднання методів обмеженого вирівнювання втрат та обмеженого

вирівнювання винагород: цей метод присуджує агентам $CEA\left(\frac{b}{2}, c\right)$, якщо $c \leq \frac{\sum b_i}{2}$ і

$\frac{b}{2} + CEL\left(\frac{b}{2}, c\right)$ в протилежному випадку. Процес, що розподіляє витрати за даним методом, полягає у послідовному застосуванні алгоритмів методів обмеженого вирівнювання винагород і обмеженого вирівнювання втрат, але використовуючи як «точки перемикання» половинні заявки, а не самі заявки агентів. Обернений талмудичний метод [3] отримується із талмудичного методу перестановкою методів обмеженого вирівнювання винагород і обмеженого вирівнювання втрат.

Метод Пініла [3] (позначатимемо Pin) отримується внаслідок подвійного застосування методу обмеженого вирівнювання винагород, використовуючи, як і в Талмудичному методі, половинні заявки, а не власне заявки агентів.

Даний метод обирає $CEA\left(\frac{b}{2}, c\right)$, якщо $c \leq \frac{\sum b_i}{2}$ і

$\frac{b}{2} + CEA\left(\frac{b}{2}, c - \frac{\sum b_i}{2}\right)$ в протилежному випадку.

Арифметичні операції над нечіткими числами

При дослідженні задач розподілу з «соціально-економічною» інтерпретацією доцільно розглядати нечіткі узагальнення чисел у вигляді трапецевидних, які мають «інтервал байдужості».

Нечітке число $\tilde{A} = (a, b, c, d)$, де $a \leq b \leq c \leq d$, називається нечітким числом трапецевидного типу, якщо його функція належності має вигляд

$$\mu_{\tilde{A}}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq a; \\ \frac{x-a}{b-a}, & a < x \leq b; \\ 1, & b < x \leq c; \\ \frac{d-x}{d-c}, & c < x \leq d; \\ 0, & x > d. \end{cases}$$

Нечітке число трапецевидного типу $\tilde{A} = (a, b, c, d)$ називається невід'ємним (неодатним), $\tilde{A} \geq 0$ ($\tilde{A} \leq 0$), тоді і тільки тоді, коли $a \geq 0$ ($c \leq 0$). Нечітке число трапецевидного типу $\tilde{A} = (a, b, c, d)$ називається додатним (від'ємним), $\tilde{A} > 0$ ($\tilde{A} < 0$), тоді і тільки тоді, коли $a > 0$ ($c < 0$).

Два нечітких числа трапецевидного типу, $\tilde{A}_1 = (a, b, c, d)$ і $\tilde{A}_2 = (e, f, g, h)$ називаються еквівалентними (рівними), якщо і тільки якщо $a = e, b = f, c = g, d = h$.

Нехай задано два невід'ємних нечітких числа трапецевидного типу, $\tilde{A}_1 = (a, b, c, d)$ і $\tilde{A}_2 = (e, f, g, h)$. Тоді [8]

1. $\tilde{A}_1 \oplus \tilde{A}_2 = (a, b, c, d) \oplus (e, f, g, h) = (a + e, b + f, c + g, d + h);$
2. $\tilde{A}_1 - \tilde{A}_2 = (a, b, c, d) - (e, f, g, h) = (a - e, b - f, c - g, d - h);$
3. $-\tilde{A}_1 = -(a, b, c, d) = (-a, -b, -c, -d);$
4. $\tilde{A}_1 \otimes \tilde{A}_2 = (a, b, c, d) \otimes (e, f, g, h) \cong (ae, bf, cg, dh);$
5. $\frac{1}{\tilde{A}_1} \cong \left(\frac{1}{a}, \frac{1}{b}, \frac{1}{c}, \frac{1}{d} \right).$

Очікуване значення нечіткого числа трапецевидного типу визначаються за формулою [9]

$$EV(\tilde{A}) = \frac{a + b + c + d}{4}.$$

Нехай $\tilde{A} = (a_1, a_2, a_3, a_4)$, $\tilde{B} = (b_1, b_2, b_3, b_4)$.

Вважатимемо що $\tilde{A} < \tilde{B} \Leftrightarrow EV(\tilde{A}) \leq EV(\tilde{B})$ [9]

Нечіткі узагальнення класичних методів розподілу

Пропонується застосувати вищевказані операції над нечіткими числами для нечітких узагальнень методів розподілу. При цьому арифметичні операції замінюються на їхні відповідники для нечітких чисел, а замість порівняння дійсних чисел пропонується порівнювати очікувані величини нечітких трапецевидних чисел.

Нехай запаси грошей агентів та кількість витрат, котрі необхідно покрити, є нечіткими числами трапецевидного типу, відповідно $\tilde{b}_i = (b_i^{L_1}; b_i^{L_2}; b_i^{R_1}; b_i^{R_2})$, $\forall i \in N$, та $\tilde{c}_i = (c_i^{L_1}; c_i^{L_2}; c_i^{R_1}; c_i^{R_2})$. При даному підході випадок нечітких чисел трикутного типу (як найбільш уживаного) та чітких дійсних чисел є частинними випадками. Так, для нечітких чисел трикутного вигляду $b_i^{L_2} = b_i^{R_1}$ або $c_i^{L_2} = c_i^{R_1}$, у

випадку ж чітких чисел маємо справу з трапецевидними нечіткими числами, для яких всі чотири компоненти рівні.

Найпростішим для обчислення при даному узагальненні є пропорційний податок. Оскільки для знаходження «чіткого пропорційного» податку ми використовуємо аналітичну формулу, то замінивши всі арифметичні операції на їхні нечіткі відповідники, отримаємо аналогічну формулу для нечіткого випадку:

$$\tilde{x}_i = \left(\frac{b_i^{L_1}}{\sum_{i=1}^n b_i^{R_2}} c^{L_1}; \frac{b_i^{L_2}}{\sum_{i=1}^n b_i^{R_1}} c^{L_2}; \frac{b_i^{R_1}}{\sum_{i=1}^n b_i^{L_2}} c^{R_1}; \frac{b_i^{R_2}}{\sum_{i=1}^n b_i^{L_1}} c^{R_2} \right).$$

У випадку ж інших методів розподілу слід застосовувати класичні алгоритми, замінюючи відповідні арифметичні операції на нечіткі, а для порівняння чисел використовувати порівняння їх очікуваних значень.

Розглянемо приклад.

Є п'ять агентів, серед яких необхідно розподілити витрати величиною $c = (29, 30, 31)$. Запаси грошей агентів відповідно рівні $(3, 4, 5)$, $(11, 12, 13)$, $(19, 20, 21)$, $(23, 24, 25)$, $(29, 30, 31)$.

Спершу розглянемо пропорційний податок. Оскільки, як вже зазначалось, нечіткі числа трикутного типу є частинним випадком нечітких чисел трапецевидного типу, то можемо записати, що $c = (29, 30, 30, 31)$, а запаси грошей рівні $(3, 4, 4, 5)$, $(11, 12, 12, 13)$, $(19, 20, 20, 21)$, $(23, 24, 24, 25)$, $(29, 30, 30, 31)$.

Можемо підставити відповідні значення у вищевказану формулу:

$$\tilde{x}_1 = \left(\frac{3}{95} \cdot 29; \frac{4}{90} \cdot 30; \frac{4}{90} \cdot 30; \frac{5}{85} \cdot 31 \right) \approx (0,92; 1,33; 1,33; 1,82);$$

$$\tilde{x}_2 = \left(\frac{11}{95} \cdot 29; \frac{12}{90} \cdot 30; \frac{12}{90} \cdot 30; \frac{13}{85} \cdot 31 \right) \approx (3,36; 4,4; 4,4; 4,74);$$

$$\tilde{x}_3 = \left(\frac{19}{95} \cdot 29; \frac{20}{90} \cdot 30; \frac{20}{90} \cdot 30; \frac{21}{85} \cdot 31 \right) \approx (5,8; 6,67; 6,67; 7,66);$$

$$\tilde{x}_4 = \left(\frac{23}{95} \cdot 29; \frac{24}{90} \cdot 30; \frac{24}{90} \cdot 30; \frac{25}{85} \cdot 31 \right) \approx (7,02; 8,8; 8,8; 9,12);$$

$$\tilde{x}_5 = \left(\frac{29}{95} \cdot 29; \frac{30}{90} \cdot 30; \frac{30}{90} \cdot 30; \frac{31}{85} \cdot 31 \right) \approx (8,85; 10,10; 10,10; 11,31).$$

Можемо повернутися до нечітких чисел трикутного типу і записати результат. Отже, за пропорційним податком частки витрат агентів будуть такими: $(0,92; 1,33; 1,82)$; $(3,36; 4,4; 4,74)$; $(5,8; 6,67; 7,66)$; $(7,02; 8,8; 9,12)$; $(8,85; 10,10; 11,31)$.

Знайдемо частки витрат агентів за подушним податком.

Якщо порівну поділити витрати між агентами, то частка витрат окремого агента була б нечітким числом трапецевидного типу, а саме (5,8;6;6;6,2).

Знайдемо очікуване значення даного нечіткого числа: $\frac{1}{4}(5,8+2 \cdot 6+6,2)=6$. Порівняємо з очікуваним значенням запасу грошей першого агента: $\frac{1}{4}(3+2 \cdot 4+5)=4 < 6$. Отже, часткою витрат першого агента буде його запас грошей, тобто (3;4;4;5).

Величина витрат, яку залишилось розподілити, рівна (29,30,30,31) - (3,4,4,5) = (26,26,26,26). Дану величину витрат потрібно поділити між чотирма агентами. При цьому витрати кожного агента визначатимуться нечітким числом (6,5;6,5;6,5;6,5), що еквівалентно числу 6,5 (яке є очікуваним значенням даного трапецевидного числа).

Очікуваним значенням запасу грошей другого агента є $\frac{1}{4}(11+2 \cdot 12+13)=12 > 6,5$, а отже частка витрат другого агента буде рівна (6,5;6,5;6,5;6,5). Оскільки запаси грошей інших агентів теж є більшими (в чому неважко переконатися, знайшовши їхні очікувані значення), то частки витрати всіх інших агентів також будуть рівними (6,5;6,5;6,5;6,5).

Перейшовши до нечітких чисел трикутного вигляду, можемо записати частки витрат всіх агентів: (3,4,5); (6,5;6,5;6,5); (6,5;6,5;6,5); (6,5;6,5;6,5); (6,5;6,5;6,5).

Для знаходження рівневого податку, знайдемо нечітке число $\frac{\sum_{i=1}^n \tilde{b}_i - \tilde{c}}{n}$ (запас вільних грошей максимальної коаліції). Результатом виконання відповідних операцій є нечітке число трапецевидного типу (10,8; 12; 12; 13,2). Очікуваним значенням даного нечіткого числа є 12. Оскільки $12 > 4$ (очікуване значення запасу грошей першого агента), то часткою витрат першого агента буде число (0;0;0;0).

Виключимо першого агента з розподілу і перерахуємо запас вільних грошей для агентів, що залишилися. Отримаємо:

$$\frac{\sum_{i=2}^5 \tilde{b}_i - \tilde{c}}{4} = (12,75; 14; 14; 15,25).$$

Очікуваним значенням даного трапецевидного нечіткого числа є $56/4 = 14$. Оскільки очікуваним запасом грошей другого

агента є $12 < 14$, то часткою витрат другого агента буде також число (0;0;0;0).

Виключимо другого агента з розподілу і перерахуємо запас вільних грошей для трьох агентів, що залишилися. Маємо:

$$\frac{\sum_{i=3}^5 \tilde{b}_i - \tilde{c}}{3} = (13\frac{1}{3}; 14\frac{2}{3}; 14\frac{2}{3}; 16).$$

Очікуваним значенням даного нечіткого числа буде $14\frac{2}{3}$. Це менше, ніж 20 (очікуване значення запасу грошей третього агента). Тому часткою витрат третього агента буде нечітке число, рівне

$$\tilde{b}_3 - \frac{\sum_{i=3}^5 \tilde{b}_i - \tilde{c}}{3} = (3; 5\frac{1}{3}; 5\frac{1}{3}; 6\frac{2}{3}).$$

Залишається розподілити $\tilde{c} - \tilde{x}_3 = (22\frac{1}{3}; 24\frac{2}{3}; 24\frac{2}{3}; 28)$ одиниць витрат між двома агентами, що залишилися.

Оскільки очікувані значення запасів грошей агентів, що залишилися, також будуть більшими $14\frac{2}{3}$ (в чому неважко переконатися), то можемо обчислити їхні частки витрат, відповідно, $(7; 9\frac{1}{3}; 9\frac{1}{3}; 11\frac{2}{3})$ і $(13; 15\frac{1}{3}; 15\frac{1}{3}; 17\frac{2}{3})$.

Отже, витрати за рівневим податком рівні (0,0,0); (0,0,0); $(3; 5\frac{1}{3}; 6\frac{2}{3})$; $(7; 9\frac{1}{3}; 11\frac{2}{3})$ і $(13; 15\frac{1}{3}; 17\frac{2}{3})$.

Оскільки наступні три методи базуються на подушному та рівневому податках, то можемо опустити процес обчислень. Результуючими розподілами будуть такі:

Талмудичний метод - (1.5,2,2.5); (5.5,6,6.5); (6.67,7.33,8); (6.67,7.33,8); (6.67,7.33,8).

Обернений талмудичний метод - (0,0,0); (1.25,2.75,4.25); (5.25,6.75,8.25); (7.25,8.75,10.25); (10.25, 11.75,13.25).

Метод Пініла - (1.5,2,2.5); (5.5,6,6.5); (6.67,7.33,8); (6.67,7.33,8); (6.67,7.33,8).

Нечіткі узагальнення індексів нерівності

Основним критерієм оцінки різних розподілів ресурсів між агентами є індекси нерівності [10].

В даній статті розглянемо такі індекси:

$$\text{Джині: } G = \frac{2 \sum_{i=1}^n i y_i}{n \sum_{i=1}^n y_i} - \frac{n+1}{n};$$

- Тейла: $T = \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{\bar{y}} \ln \frac{y_i}{\bar{y}}$, де $\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}$;

- Аткинсона: $A = 1 - e^{-T}$.

Тут y_i означають запаси грошей агентів.

Оскільки у нас задача розподілу інтерпретується як задача розподілу витрат, то $y_i = b_i - x_i, \forall i \in N$.

Нехай внаслідок застосування деякого методу розподілу ми отримали певні величини витрат агентів, які є нечіткими числами трапецевидного типу, $\tilde{x}_i = (x_i^{L_1}; x_i^{L_2}; x_i^{R_1}; x_i^{R_2})$. Не зменшуючи загальності, припустимо, що запаси витрат агентів та величина витрат, яку необхідно розподілити, також є нечіткими числами трапецевидного типу.

Застосувавши відповідні арифметичні операції, отримаємо такі формули для основних індексів нерівності:

- індекс Джині:

$$\tilde{G} = \left(\frac{2 \sum_{i=1}^n i(b_i^{L_1} - x_i^{R_2})}{n \sum_{i=1}^n (b_i^{R_2} - x_i^{L_1})} - \frac{n+1}{n}; \frac{2 \sum_{i=1}^n i(b_i^{L_2} - x_i^{R_1})}{n \sum_{i=1}^n (b_i^{R_1} - x_i^{L_2})} - \frac{n+1}{n}; \right. \\ \left. \frac{2 \sum_{i=1}^n i(b_i^{R_1} - x_i^{L_2})}{n \sum_{i=1}^n (b_i^{L_2} - x_i^{R_1})} - \frac{n+1}{n}; \frac{2 \sum_{i=1}^n i(b_i^{R_2} - x_i^{L_1})}{n \sum_{i=1}^n (b_i^{L_1} - x_i^{R_2})} - \frac{n+1}{n} \right);$$

- індекс Тейла:

$$\tilde{T} = \left(\sum_{i=1}^n \frac{y_i^{L_1}}{\bar{y}} \ln \frac{y_i^{L_1}}{\bar{y}}; \sum_{i=1}^n \frac{y_i^{L_2}}{\bar{y}} \ln \frac{y_i^{L_2}}{\bar{y}}; \sum_{i=1}^n \frac{y_i^{R_1}}{\bar{y}} \ln \frac{y_i^{R_1}}{\bar{y}}; \right. \\ \left. \sum_{i=1}^n \frac{y_i^{R_2}}{\bar{y}} \ln \frac{y_i^{R_2}}{\bar{y}} \right), \text{ де } \tilde{\bar{y}} = \left(\sum_{i=1}^n \frac{(b_i^{L_1} - x_i^{R_2})}{\sum_{k=1}^n (b_k^{R_2} - x_k^{L_1})}; \right.$$

$$\left. \sum_{i=1}^n \frac{(b_i^{L_2} - x_i^{R_1})}{\sum_{k=1}^n (b_k^{R_1} - x_k^{L_2})}; \sum_{i=1}^n \frac{(b_i^{R_1} - x_i^{L_2})}{\sum_{k=1}^n (b_k^{L_2} - x_k^{R_1})}; \sum_{i=1}^n \frac{(b_i^{R_2} - x_i^{L_1})}{\sum_{k=1}^n (b_k^{L_1} - x_k^{R_2})} \right);$$

- індекс Аткинсона:

$$\tilde{A} = (1 - e^{-T^{R_2}}; 1 - e^{-T^{R_1}}; 1 - e^{-T^{L_2}}; 1 - e^{-T^{L_1}}).$$

Дані формули дозволяють обчислити індекси нерівності для нечітких часток витрат агентів. Результатом є нечітке число трапецевидного типу.

В нечітких узагальненнях методів розподілу, котрі передбачають перерозподіл витрат між агентами, виникають правосторонні нечіткі числа. Їх можна представити у вигляді нечітких чисел трапецевидного типу: $(0; 0; x_i^L; x_i^R)$, де

$$x_i^L = \begin{cases} (1 - \alpha)\hat{x}_i, i \in N_1; \\ \hat{x}_i, i \in N_2, \end{cases}, x_i^R = \begin{cases} \hat{x}_i, i \in N_1; \\ (1 + \beta)\hat{x}_i, i \in N_2. \end{cases}$$

Знайдемо вигляд індексів Джині, Тейла та Аткинсона, користуючись означеннями операцій над трапецевидними нечіткими числами. Для цього представимо величини витрат у вигляді $(\varepsilon; \varepsilon; x_i^L; x_i^R)$, де $\varepsilon, \varepsilon > 0$, деяке близьке до нуля число.

В результаті виконання арифметичних операцій над даними нечіткими числами, отримаємо деякі нові нечіткі числа трапецевидного типу, не обов'язково додатні. Тому при дефазифікації отриманих чисел, ми можемо отримати значення, що не належать проміжку $[0, 1]$.

Щоб уникнути цього, є сенс зробити певні перетворення, привівши індекси до такого вигляду, при якому вони зможуть приймати значення тільки із проміжку $[0, 1]$.

Для цього потрібно виконати наступні дії:

1. Перейти до границі при $\varepsilon \rightarrow 0$.

2. Зробити перенесення по осі x таким чином, щоб лівий кінець трапецевидного нечіткого числа змістився в початок координат.

Пронормувати отримане число таким чином, щоб правий кінець співпав з точкою $(1, 0)$.

В результаті отримаємо нечіткі числа трапецевидного типу $(0; \gamma; \delta; 1)$, де коефіцієнти γ та δ знаходяться окремо для кожного індексу нерівності.

Тоді відповідне значення індексу обчислюватиметься за формулою:

$$I = \frac{1}{3} \left(1 + \gamma + \delta - \frac{\delta}{1 + \delta - \gamma} \right).$$

Для даного індексу виконується нерівність $0 \leq I \leq 1$, що впливає з його побудови. Також, з огляду на те, що $0 \leq \gamma \leq \delta \leq 1$, функція I є неперервною. Довизначимо I таким чином:

$$I = \begin{cases} 0, b_i - x_i = b_j - x_j, \forall i, j \in N; \\ \frac{1}{3} \left(1 + \gamma + \delta - \frac{\delta}{1 + \delta - \gamma} \right), \text{ в іншому випадку.} \end{cases}$$

Визначена таким чином функція I за означенням є індексом нерівності [10].

Слід відмітити, що можливим є і застосування інших методів дефазифікації. Так, у

якості значення шуканого індексу нерівності можна взяти очікуване значення відповідного нечіткого числа трапецевидного типу.

Висновки

В статті пропонуються нечіткі узагальнення класичних методів розподілу, які базуються на нечіткій арифметиці. Оскільки «звичайні» числа є частинним випадком нечітких чисел, то

Список використаних джерел

1. Волошин О.Ф. Моделі та методи прийняття рішень / О.Ф. Волошин, С.О. Машенко. - К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2010. - 336 с.
2. Moulin H. Axiomatic Cost and Surplus-Sharing / H.Moulin. - Working Papers 2001-06, Rice University, Department of Economics, 2001.
3. William T. Axiomatic and game-theoretic analysis of bankruptcy and taxation problems: an update / T.Thomson - RCER Working Papers 578, University of Rochester, 2013.
4. Branzei R. Bankruptcy problems with interval uncertainty / R. Branzei, S. Z. Alparslan Gök. // Economics Bulletin. - 2008. - №3. - С. 1-10.
5. Zimmermann H.J. Fuzzy Set Theory and its Applications, Fourth Edition / H.J.Zimmermann. - Kluwer Boston, 2001.
6. Laver V. O. Fuzzy generalizations for the proportional rule / V.O. Laver. // Вісник КНУ імені Тараса Шевченка. Серія: Фізико-математичні науки. - 2013. - №2. - С. 85-88.
7. Волошин О. Ф. Аксиоматична характеристика нечітких узагальнень методів розподілу витрат / О. Ф. Волошин, В. О. Лавер. // Вісник КНУ імені Тараса Шевченка. Серія: Фізико-математичні науки. - 2014. - №1. - С. 128-132.
8. Bansal A. Trapezoidal fuzzy numbers (a,b,c,d) : Arithmetic Behavior / Abhinav Bansal. // International Journal of Physical and Mathematical Sciences. - 2011. - №2. - С. 39-44.
9. Heilpern S. Comparison of Fuzzy Numbers in Decision Making / Stanisław Heilpern. // Tatra Mountains Mathematical Publications. - 1995. - №6. - С. 47-53.
10. Cowell F. Measuring Inequality / Frank Cowell. - Oxford: Oxford University Press, 2011. - 256 с

класична задача розподілу може бути інтерпретована як частинний випадок.

Також наводяться нечіткі узагальнення основних індексів нерівності з метою об'єктивного порівняння запропонованих нечітких методів розподілу з врахуванням нечіткості даних про доходи агентів.

References

1. VOLOSHYN O.F., MASCHENKO S.O. (2010). *Models and Methods of Decision-Making*. Textbook. Publishing center "Kyiv University", Kyiv.
2. MOULIN H. (2001). *Axiomatic Cost and Surplus-Sharing*. Working Papers 2001-06, Rice University, Department of Economics.
3. THOMSON W. (2013). *Axiomatic and game-theoretic analysis of bankruptcy and taxation problems: an update*. RCER Working Papers 578, University of Rochester.
4. BRANZEI R., ALPARSLAN GÖK S. Z. (2008) *Bankruptcy problems with interval uncertainty*. Economics Bulletin, 3, pp. 1-10.
5. ZIMMERMANN H.J. (2001) *Fuzzy Set Theory and its Applications, Fourth Edition*. Kluwer Boston MA.
6. LAVER V. O. (2013) *Fuzzy generalizations for the proportional rule*. Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics&Mathematics, vol. 2, pp. 85-88.
7. VOLOSHYN O.F., LAVER V.O. *Axiomatic characterization of fuzzy generalizations of cost-sharing methods*. Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics&Mathematics, vol. 1, pp. 128-132.
8. BANSAL A. (2011) *Trapezoidal fuzzy numbers (a,b,c,d) : Arithmetic Behavior*. International Journal of Physical and Mathematical Sciences, 2, pp. 39-44.
9. HEILPERN S. (1995) *Comparison of Fuzzy Numbers in Decision Making*. Tatra Mountains Mathematical Publications, 6, pp. 47-53.
10. COWELL F. (2011) *Measuring Inequality, 3rd ed*. Oxford University Press, Oxford UK.

Надійшла до редколегії 11.10.15

УДК 681.3.062

Марченко О. О., д.ф.-м.н., доц.

O.O. Marchenko, Doctor of Sciences (Physics & Mathematics), Associate Professor

**Метод формального
концептуального аналізу на основі
векторів семантико-синтаксичної
валентності слів**

**A method of formal concept analysis
based on semantic-syntactic valence vectors of
words**

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4д, e-mail: rozenkrans@yandex.ua

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: rozenkrans@yandex.ua

В роботі запропоновано застосування векторів семантико-синтаксичної валентності слів як контекстних векторів в методах формального концептуального аналізу для автоматичної побудови таксономій високої якості. Дослідження та експерименти підтвердили значне зростання якості побудови таксономій із збільшенням вимірності тензорної моделі при генерації векторів семантико-синтаксичної валентності слів. Підвищення арності тензорів дає моделі можливість більш точного опису багатомірних семантико-синтаксичних зв'язків та дозволяє виділяти більше комутативних семантико-синтаксичних властивостей слів, що використовуються формальним концептуальним аналізом для побудови таксономій більш високої якості.

Ключові слова: штучний інтелект, комп'ютерна лінгвістика, онтології, бази знань.

The article is devoted to research and development of methods for automatic construction of taxonomies that is very actual and much demanded area in computational linguistics and artificial intelligence at all, given that the taxonomy is a fundamental hierarchical basis for the construction of ontological networks in knowledge bases.

The paper provides the use of semantic-syntactic valence vectors of words as context vectors in formal concept analysis methods for the automatic construction of taxonomies of high quality. Research and experiments have confirmed a significant increase in the quality of taxonomies construction using semantic-syntactic valence vectors of words in the method of formal concept analysis. And along with the increase of dimensions number of the tensor model for generating semantic-syntactic valence vectors of words comes a considerable increase in the quality of the taxonomies construction. Increasing arity of tensor model provides a more precise description of the multidimensional semantic and syntactic relations and allows to extract more commutative semantic and syntactic properties of words used by the formal concept analysis for building taxonomies of higher quality.

Keywords: artificial intelligence, computational linguistics, ontologies, knowledge bases.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

Розробка методів автоматизації побудови таксономій є актуальним та надзвичайно затребуваним напрямом у комп'ютерній лінгвістиці та взагалі у штучному інтелекті з огляду на те, що таксономії є фундаментальною ієрархічною основою для конструювання онтологічних мереж баз знань.

Формально задача полягає у побудові ієрархічного графу з вхідної множини іменників

Н із застосуванням відношення гіпонімії-гіперонімії (клас-підклас).

Серед розроблених методів автоматичної побудови таксономій обробкою текстових корпусів можна виділити два основних класи: методи, основані на кластеризації слів з мірами семантичної близькості і теоретико-множинні методи впорядкування слів-понять. Обидва класи методів працюють з моделлю векторного простору, в якому слова або терми представлені у

вигляді відповідних їм векторів ознак, отриманих при обробці та аналізі деякого текстового корпусу.

Для першого класу методів характерне використання деякої міри семантичної близькості для визначення відстані між векторами слів, щоб визначити, наскільки вони семантично подібні, і чи мають вони бути зараховані в один кластер. Наприклад, може бути використана міра косинусів кута між векторами слів. Представники цього класу методів у свою чергу поділяються на агрегативні (кластеризація знизу-вверх) і розділяючі методи (кластеризація зверху-вниз). Кращі представники методів даного напрямку описуються в роботах [1, 2, 3].

Теоретико-множинні методи здійснюють побудову таксономії встановленням часткового порядку на множині слів-понять по відношенню включення між їх множинами ознак. Одним з кращих представників цього напрямку є *формальний концептуальний аналіз* (Formal Concept Analysis, FCA) [4].

Формальний концептуальний аналіз

Метод формального концептуального аналізу працює із структурою даних, що має назву контекст K . Він представляє собою дані про лінгвістичний контекст використання слів певної предметної області поряд з деяким базовим набором лексем у текстових корпусах, що були оброблені та проаналізовані для створення таблиці K . Наприклад, це може бути матриця, що містить дані про сполучуваність входного набору термінів-іменників поряд з базовим набором якісних прикметників. В загальному вигляді можна сказати, що метод працює з таблицею *Об'єкт* $\times$ *Атрибут*. В роботі [5] наводиться контекст методу формального концептуального аналізу, представлений таблицею, яка зберігає дані про сполучуваність термінів-іменників поряд із певним набором дієслів у позиції додатку (відношення *дієслово-присудок* – *іменник-додаток*).

Терміни-іменники представлені у контексті K векторами, ненульові елементи яких позначають наявність сполучуваності даного іменника у якості додатку дієслову, що відповідають позиціям ненульових елементів. У якості значень зазвичай виступає частота сумісної появи у текстовому корпусі відповідної пари *дієслово-присудок* – *іменник-додаток*. Існують також варіанти із застосуванням бінарних матриць, що передбачають лише значення 1 та 0.

Слід відзначити, що при формуванні контексту K у якості базового набору контекстних слів, зокрема набору дієслів, як описано у прикладі вище, обирають ті слова, з якими існує стабільний зв'язок хоча б у одного із термінів-іменників з N . Тобто у базовий контекстний набір потраплятимуть лише такі дієслова, для яких існує хоча б одна така пара *дієслово-присудок* – *іменник-додаток*, для якої відносна частота використання у текстовому корпусі має перевищувати певний пороговий рівень, тобто $\forall v \in V \exists n \in N: v(v,n) \geq Th$, де V – множина дієслів, N – множина термінів-іменників, $v(v,n)$ – частота використання словосполучення v_n у корпусі текстів, Th – пороговий рівень.

Формальний концептуальний аналіз використовує теорію порядку для аналізу зв'язків між об'єктами G та їх ознаками M . Формальний концептуальний аналіз ідентифікує з формального контексту K множину ознак $B \subseteq M$, що має бієктивне відношення з множиною об'єктів $A \subseteq G$. Така бієктивно зв'язана пара має назву формальний концепт (A, B) . Формальні концепти є частково впорядкованими $(A_1, B_1) \leq (A_2, B_2) \Leftrightarrow (A_1 \subseteq A_2)$, або, що є еквівалентним, $B_2 \subseteq B_1$. Об'єкти $o_1, o_2 \in G$ – концептуально кластеризовані, якщо $\{o_1, o_2\} \subseteq A$, де (A, B) – формальний концепт в K .

З бінарного представлення об'єктів формальний концептуальний аналіз будує решітку формальних концептів. Для того, щоб інтерпретувати решітку як таксономію, застосовуються наступні два правила:

1. Вводиться один концепт таксономії C_B з міткою B для кожного формального концепту (A, B) , якщо $|A| \geq 2$. Концепти впорядковуються згідно порядку у решітці.

2. Вводиться один таксономічний концепт C_o для кожного об'єкту $o \in G$ і помічається міткою o . Концепти впорядковуються таким чином, що $C_o \leq C_B$, де (A, B) – формальний концепт та $o \in A$, і не існує формального концепту (A', B') , щоб $(A', B') \leq (A, B)$ та $o \in A'$.

Серед переваг методу формального концептуального аналізу слід зазначити якість побудованих таксономій, що є на порядок вищою, ніж в ієрархій, побудованих методами кластеризації [5]. Також відзначимо прозорість та добру інтерпретованість таксономій, згенерованих формальним концептуальним аналізом.

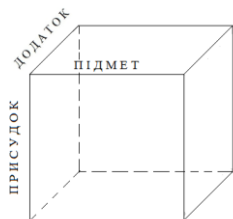
Серед недоліків методу формального концептуального аналізу слід зазначити його експоненційну часову складність $O(2^n)$, де n – кількість термінів-іменників, які треба впорядкувати у таксономію. Але на практиці метод формального концептуального аналізу демонструє час роботи, порівняний з лінійним, що відбувається через надмірну розрідженість векторного представлення термінів-іменників.

Використання векторів семантико-синтаксичної валентності у методах формального концептуального аналізу

Пропонується у якості контекстних векторів термінів-іменників використовувати вектори їх семантико-синтаксичної валентності [6].

Вектори семантико-синтаксичної валентності слів генеруються невід'ємною факторизацією тензорів частотних оцінок сумісної сполучності слів в різних синтаксичних позиціях у великих текстових корпусах.

Тривимірний тензор для зберігання частотних даних сполучностей слів – підметів, присудків та прямих додатків, отриманих в результаті аналізу великих текстових корпусів, зображений на малюнку 1.



Малюнок 1. Тривимірний тензор для зберігання частотних даних сполучностей слів – підметів, присудків та прямих додатків.

В результаті частотного аналізу текстових корпусів формується розріджений тензор великої розмірності. З метою отримання більш стислого та зручного представлення до тензору застосовується невід'ємна тензорна факторизація [6].

Основна ідея методу полягає в мінімізації суми квадратів різниць між оригіналом тензору та його факторизованою моделлю. Для тривимірного випадку тензору $T \in R^{D1 \times D2 \times D3}$ це відповідає рівнянню

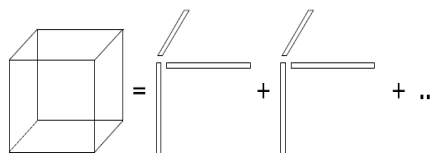
$$\min_{x_i \in R^{D1}, y_i \in R^{D2}, z_i \in R^{D3}} \|T - \sum_{i=1}^k x_i \circ y_i \circ z_i\|_F^2, \text{ де } k -$$

число вимірів у факторизованій моделі.

При невід'ємній тензорній факторизації додається обмеження невід'ємності, перетворюючи модель у

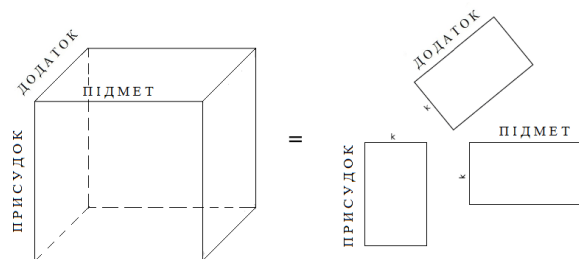
$$\min_{x_i \in R_{\geq 0}^{D1}, y_i \in R_{\geq 0}^{D2}, z_i \in R_{\geq 0}^{D3}} \|T - \sum_{i=1}^k x_i \circ y_i \circ z_i\|_F^2$$

Модель можна представити графічно наступним чином, враховуючи, що дана декомпозиція складається з суми зовнішніх добутків трійок векторів (по числу вимірів тензору).



Малюнок 2. Графічне представлення невід'ємної тензорної факторизації як суми зовнішніх добутків.

Декомпозиція невід'ємної тензорної факторизації для тензору частотних оцінок сполучностей слів «підмет» × «присудок» × «додаток» у вигляді трьох матриць представлена на малюнку 3.



Малюнок 3. Графічне представлення невід'ємної тензорної факторизації для лінгвістичного тензору.

Використовуючи модель невід'ємної тензорної факторизації для аналізу тривимірних сполучностей (s, v, o) («підмет» × «присудок» × «додаток»), з текстових корпусів виділяють узагальнені моделі селективних преференцій, а також деякі елементи моделей фреймової семантики (семантичних відмінків).

В результаті факторизації кожен підмет-іменник, присудок-дієслово та додаток-іменник отримує власний вектор розмірності k з відповідних матриць.

Оригінальне значення з тензору T для трійки (s, v, o) x_{svo} може бути відновлене у факторизованій моделі обчисленням суми

$$x_{svo} = \sum_{i=1}^k s_{si} v_{vi} o_{oi}.$$

Для того, щоб обчислити оцінку частоти для сполучення (*мисливець застрелив вовка*) потрібно знайти вектор-підмет для слова *мисливець*, потім вектор-присудок для значення *застрелив*, і, нарешті, вектор-додаток для слова *вовк*. Потім згідно попередньої формули обчислюється оцінка частоти для даного сполучення слів. Якщо оцінка більша за деякий пороговий рівень, то можна зробити висновок про можливість існування даного речення у мові.

Вектори з матриць факторизованого тензору описують комутативні властивості слів. Вони прописують, які зв'язки утворюють дані слова – з якими лексемами та у яких синтаксичних позиціях. У даних векторів присутня як синтаксична, так і семантична складова. Тому вектори були названі векторами семантико-синтаксичної валентності слів.

Для генерації векторів семантико-синтаксичної валентності іменників з вхідної множини термінів N потрібно було випробувати декілька тензорних моделей.

Пропонується використати двовимірну модель, базовану на матриці частот сумісної сполучуваності слів у парах «присудок-додаток» в текстових корпусах, а також – тривимірну модель для представлення сполучностей типу «підмет-присудок-прямий_додаток» і чотирьохвимірну модель «підмет-присудок-прямий_додаток-непрямий_додаток».

Експерименти

Методика. В якості базового алгоритму формального концептуального аналізу був обраний метод, описаний у [7]. Для застосування у даному методі формального концептуального аналізу контекстних векторів було запропоновано використати вектори семантико-синтаксичної валентності іменників в синтаксичній позиції додатку. Для цього було зібрано та факторизовано наступні тензори:

- двовимірна модель – матриця «присудок-прямий_додаток»;
- тривимірна модель – тензор «підмет-присудок-прямий_додаток»;
- чотиривимірна модель – тензор «підмет-присудок-прямий_додаток-непрямий_додаток».

Для збірки тензорів в якості текстових корпусів були використані тексти статей English Wikipedia. Для кожного слова з вхідної множини

іменників N до навчальної вибірки були включені всі статті English Wikipedia, які містили дане слово у назві. Потім до вибірки були включені ті статті English Wikipedia, що пов'язані із вже включеними сторінками зв'язками типу *категорія* та зв'язками-посиланнями.

Далі було виконано фільтрацію навчальної вибірки. Для цього було застосовано кластеризацію зібраних текстів методом латентного семантичного аналізу [8]. Після виконання кластеризації найбільший кластер текстів обирається у якості навчальної вибірки текстів.

Після цього слідує етап збірки матриці та тензорів. Він полягає у виконанні синтаксичного аналізу текстів вибірки із застосуванням Стенфордського парсеру та у заповненні значень елементів масивів. Наприклад, якщо при аналізі синтаксичної структури речення з'ясувалося, що підметом є слово «мисливець», присудком – «вполював», додатком – «кабана», то відбувається збільшення значення елементу $T[i,j,k]$, де i – індекс слова «мисливець», j – індекс слова «вполював», k – індекс слова «кабана»: $T[i,j,k] = T[i,j,k] + 1$. В результаті обробки всієї вибірки елемент $T[i,j,k]$ буде містити частоту використання у ній словосполучення *мисливець вполював кабана*.

У випадку відсутності певного елементу трійки чи четвірки відсутній елемент заповнюється порожнім словом $\emptyset$. Наприклад, для чотирьохвимірної моделі «підмет-присудок-прямий_додаток-непрямий_додаток» у реченні *мисливець вполював кабана* відсутня позиція непрямиго додатку, тому воно замінюється реченням *мисливець вполював кабана_∅*. Якщо не вистачає більше одного елементу структури, то такі дані не вносяться у тензор.

Після збірки тензору відбувається обнуління всіх елементів масиву, що не перевищують певного порогового значення, для того, щоб залишити у масиві лише стійкі дані та позбутися помилок.

Після етапу збірки матриці та тензорів виконується їх невід'ємна факторизація. Для невід'ємної факторизації матриці двовимірної моделі був використаний метод Лі-Сунга [9]. Для невід'ємної факторизації тривимірного та чотиривимірного тензорів був використаний метод Parafac [10].

Після того для усіх іменників з вхідної множини N були зібрані вектори з матриць додатків. Ці вектори семантико-синтаксичної валентності іменників були використані методом

формального концептуального аналізу [7] у якості контекстних векторів для побудови таксономій з іменників множини N .

Для оцінки якості алгоритмів побудови таксономій зазвичай використовуються методи порівняння згенерованих алгоритмами таксономій з деякою еталонною, в якості якої виступають таксономії, зібрані вручну.

Для гарантування наявності еталонної таксономії, зібраної вручну, вхідна множина іменників N формувалася наступним чином. У якості еталонної таксономії береться певна підмережа з лексико-семантичної бази WordNet, починаючи з деякого вузла N_0 у якості кореня, та всі його нащадки на відстані 4-5 разом із відношеннями гіпонімії-гіперонімії між ними. Для формування вхідної множини N зі всіх вузлів даної підмережі були взяті перші слова їх синсетів.

Для обчислення оцінок структурної близькості таксономій, отриманих алгоритмом, до еталонної була застосована методика, описана в [5].

Результати експериментів. Було проведено 3 серії експериментів – для множини N , що відповідає $N_0 =$ «транспорт», для множини N , що відповідає $N_0 =$ «їжа» та для множини N , що відповідає $N_0 =$ «професії».

Метод формального концептуального аналізу використовував у якості контекстних векторів:

- 1) вектори з простої матриці інцидентності слів у парах «присудок-додаток» (як це описано в роботі [5]) у якості базового оціночного рівня;
- 2) вектори семантико-синтаксичної валентності іменників-додатків з факторизованої матриці двовимірної моделі;
- 3) вектори семантико-синтаксичної валентності іменників-додатків з факторизованого тензору тривимірної моделі;
- 4) вектори семантико-синтаксичної валентності іменників-додатків з факторизованого тензору чотиривимірної моделі.

В результаті кожної серії було побудовано чотири таксономії T_1, T_2, T_3, T_4 , які були досліджені на структурну подібність до еталонної таксономії з WordNet. Оцінки представлені у таблиці 1.

Таблиця 1. Оцінки структурної подібності побудованих таксономій до еталонних

	T_1	T_2	T_3	T_4
$N_0 =$ «транспорт»	67.39 %	70.21 %	76.47 %	78.73%
$N_0 =$ «їжа»	65.98 %	68.29 %	73.41 %	75.12%
$N_0 =$ «професії»	68.01 %	70.77 %	77.81 %	79.37%

Отримані оцінки свідчать про беззаперечну перевагу застосування векторів семантико-синтаксичної валентності слів у методах формального концептуального аналізу по відношенню до використання простих контекстних векторів з матриць інцидентності слів. При цьому є помітне зростання точності таксономій, побудованих на основі векторів семантико-синтаксичної валентності слів, із збільшенням вимірності тензорної моделі. Це відбувається через те, що в тензорних багатовимірних моделях враховуються тонкі складні багатовимірні зв'язки предикатно-аргументного типу між дієсловами та їх аргументами-іменниками, що є недоступним для двовимірних моделей. Навіть невід'ємна факторизація двовимірної матриці інцидентності дає помітне покращення якості таксономії у порівнянні з використанням алгоритмом простого контексту, так як невід'ємна факторизація надійно виділяє чіткі та стійкі зв'язки з матриці інцидентності.

Подальше збільшення вимірності тензорної моделі дозволяє накопичувати більший об'єм багатомірних складних семантико-синтаксичних даних та виділяти більше семантико-синтаксичних зв'язків, які використовуються як атрибути у методі формального концептуального аналізу, що підвищує якість побудованих таксономій.

Висновки

В роботі запропоновано застосування векторів семантико-синтаксичної валентності слів як контекстних векторів в методах формального концептуального аналізу для автоматичної побудови таксономій високої якості. Дослідження та експерименти підтвердили значне зростання якості побудови таксономій із збільшенням вимірності тензорної моделі при генерації векторів семантико-синтаксичної валентності слів. Підвищення арності тензорів дає моделі можливість більш точного опису багатомірних семантико-синтаксичних зв'язків та дозволяє виділяти більше комутативних семантико-синтаксичних властивостей слів, що використовуються формальним концептуальним аналізом для побудови таксономій більш високої якості.

Список використаних джерел

1. Caraballo S.A. Automatic construction of a hypernym-labeled noun hierarchy from text / S.A. Caraballo // Proceedings of the 37th Annual Meeting of the ACL. – 1999. – pp.120-126.
2. Hindle D. Noun classification from predicate-argument structures / D. Hindle // Proceedings of the Annual Meeting of the ACL-90. – 1990. – P. 268-275.
3. Pereira F. Distributional clustering of English words / F. Pereira, N. Tishby, L. Lee // Proceedings of the 31st Annual Meeting of the ACL, Columbus, Ohio, USA. – 1993. – P. 183-190.
4. Ganter B. Formal Concept Analysis: Mathematical Foundations/ B. Ganter, R. Wille. – New York: Springer-Verlag. – Secaucus. Inc. – 1999. – pp. 284.
5. Cimiano P. Comparing conceptual, divisive and agglomerative clustering for learning taxonomies from text/ P. Cimiano, A. Hotho, S. Staab // In Proceedings of the European Conference on Artificial Intelligence (ECAI). – 2004. – P. 435-439.
6. Анисимов А.В. Определение семантических валентностей концептов онтологий с помощью неотрицательной факторизации тензоров больших текстовых корпусов / А.В. Анисимов, А.А. Марченко, Т.Г. Вознюк // Кибернетика и системный анализ. – 2014. – № 3. – С. 3-16.
7. Vychodil V. A new algorithm for computing formal concepts / V. Vychodil // In Proceedings of the 19th European Meeting on Cybernetics and Systems Research, Vienna. – 2008. – P. 15-21.
8. Deerwester S. Indexing by latent semantic analysis / S. Deerwester, S. T. Dumais, G.W. Furnas, T.K. Landauer, R. Harshman// Journal of the Association for Information Science. – 1990. – № 41(6). – P. 391-407.
9. Lee D.D. Algorithms for non-negative matrix factorization / D.D. Lee, S.H. Seung // In Proceedings of the NIPS-2000. – 2000. – P. 556-562.
10. Cichocki A. Nonnegative Matrix and Tensor Factorizations: Applications to Exploratory Multi-way Data Analysis and Blind Source Separation / A. Cichocki, R. Zdunek, A.-H. Phan, S.-I. Amari// Chichester: J. Wiley & Sons. – 2009. – p. 477.

References

1. CARBALLO S.A. (1999) *Automatic construction of a hypernym-labeled noun hierarchy from text*, Proceedings of the 37th Annual Meeting of the ACL-99, pp.120-126.
2. HINDLE D. (1990) *Noun classification from predicate-argument structures*, Proceedings of the Annual Meeting of the ACL-1990, pp. 268-275.
3. PEREIRA F., TISHBY N., LEE L. (1993) *Distributional clustering of English words*, Proceedings of the 31-st Annual Meeting of the ACL, Columbus, Ohio, USA, pp. 183-190.
4. GANTER B., WILLE R. (1999) *Formal Concept Analysis: Mathematical Foundations*, New York: Springer-Verlag, Secaucus. Inc., P. 284.
5. CIMIANO P., HOTH O A., STAAB S. (2004) *Comparing conceptual, divisive and agglomerative clustering for learning taxonomies from text*, Proceedings of the European Conference on Artificial Intelligence (ECAI-2004), pp. 435-439.
6. ANISIMOV A. V., MARCHENKO A. A., VOZNIUK T. G. (2014), *Determination of semantic valences of ontologies concepts using non-negative tensor factorization of large text corpora*, Cybernetics and System Analysis 3, pp. 3-16.
7. VYCHODIL V. (2008) *A new algorithm for computing formal concepts*, Proceedings of the 19-th European Meeting on Cybernetics and Systems Research, Vienna, pp. 15-21.
8. DEERWESTER S., DUMAIS S. T., FURNAS G. W., LANDAUER T. K., HARSHMAN R. (1990) *Indexing by latent semantic analysis*, Journal of the Association for Information Science 41(6), pp. 391-407.
9. LEE D. D., SEUNG S. H. (2000) *Algorithms for non-negative matrix factorization*, Proceedings of the NIPS-2000, pp. 556-562.
10. CICHOCKI A., ZDUNEK R., PHAN A.-H., AMARI S.-I. (2009) *Nonnegative Matrix and Tensor Factorizations: Applications to Exploratory Multi-way Data Analysis and Blind Source Separation*, Chichester: J. Wiley & Sons, P. 477.

Надійшла до редколегії 01.09.15

УДК 681.3.06

Пискунов А.Г., к.ф.-м.н., с.н.с

Об отличиях между понятиями типа и класса

Национальный авиационный университет
г. Киев, 03165, просп. Космонавта Комарова, 1,
e-mail: agp1.ua@gmail.com

A.G. Piskunov, Ph.D

About the differences between the notions of type and class

National Aviation University of Kyiv,
03165, Kyiv, 1, Kosmonavta Komarova str.,
e-mail: agp1.ua@gmail.com

У статті застосовується метод розробки програмного забезпечення RAISE від групи авторів RAISE Development Group (далі RDG) для формального аналізу прикладу Роберта Мартіна, що ілюструє принцип підстановки (або інакше принцип заміщення) Барбара Лісков. Таким способом вдалося уточнити поняття типу, успадкування, виділення підтипу і взаємозв'язок між ними.

Під типом пропонується розуміти набір вимог (або аксіом) A до деякої множини значень X і до деякої множини функцій F , заданих на множині X , тобто трійку $T = \{A, X, F\}$. Виділенням підтипу назвемо додавання до набору A нових вимог і/або нових функцій до набору F . Зрозуміло, що нові вимоги не повинні суперечити вже існуючим. Такі зміни в аксіомах і функціях можуть спричинити необхідність заміни початкової множини значень X на деяку іншу – $X1$. Таким чином, отримуємо нову трійку $T1 = \{A1, X1, F1\}$, яка буде називатися підтипом типу T . Класом, слідом за Берtrandом Мейєром будемо називати реалізацію типу в деякій мові програмування.

Вдалося показати, що тип класу спадкоємця, не є підтипом батьківського класу, так як набори аксіом з типів спадкоємця і батька виявляються несумісними.

Ключові слова: тип, клас, RAISE Development Method.

In the article, the method of software development RAISE, after a group of authors called the RAISE Development Group (RDG further) is using for formal analysis of some example by Robert Martin. This example illustrates the Liskov substitution principle. In this way it was possible to clarify the concepts of type, inheritance, subtyping and the relation between all of them. Let the triplet $T = (A, X, F)$, where A is the set of requirements (or axioms) A to some set of values of X and to some set of functions F defined on the set X is called the type. If some new requirements would be added to A or/and some new functions would be added to F then the new triplet $T1 = (A1, X1, F1)$ would be called the subtyping. It is clear that the new requirements should not contradict the existing ones. There is a new set of values of $X1$ in triplet $T1$ because of discussed modification of the set of axioms $A1$ and/or the set of functions $F1$. And $T1$ will be called subtype of T . Class, followed by Bertrand Meyer, will be called any implementation of a type in any programming language. It was shown that the class inheritance can lead to the violation of the property to be a subtype. That is, the type of successor class, generally speaking, is not a subtype of the type the parent class. It was happened because the sets of axioms of the successor type and parent type are incompatible.

Some- certain

Keywords: type, class, RAISE Development Method.

Статтю представив професор Буй Д.Б.

1. Введение

Понятию *тип* уделяли внимание многие авторы, например, Деннис Бюрнер (Dines Björner) [1] или Люка Карделли [2]. Но эти их работы носили описательный характер, что ограничивает возможность использования в короткой статье. А принцип подстановки Лисков

короткий и, поэтому, может быть подвергнут формальному анализу. В работе будет рассмотрен пример из статьи Роберта Мартина [3], показывающий некоторое несоответствие между наследованием в языке C++ и выделением подтипа.

Принцип подстановки Лисков Мартин формулирует следующим образом: If for each object $o1$ of type S there is an object $o2$ of type T such that for all programs P defined in terms of T , the behavior of P is unchanged when $o1$ is substituted for $o2$ then S is a subtype of T . Перевод может звучать как: «если для каждого объекта $o1$ типа S существует объект $o2$ типа T такие что, любая программа P , записанная в терминах T , не изменяет своего поведения при подстановке объекта $o1$ вместо объекта $o2$, то тип S является подтипом T ». Для лучшего понимания принципа, рассмотрим пример Мартина с наследованием класса квадратов из класса прямоугольников. Определим родительский класс *Rectangle*.

```
---- File: ./rsl/rectangle.cpp
class Rectangle{
public:
    virtual void SetWidth(double w) {itsWidth=w;}
    virtual void SetHeight(double h) {itsHeight=h;}
    double GetHeight() const {return itsHeight;}
    double GetWidth() const {return itsWidth;}
private:
    double itsWidth;
    double itsHeight;
};
---- End Of File: ./rsl/rectangle.cpp
```

и наследуем из него класс *Square*

```
---- File: ./rsl/square.cpp

class Square : Rectangle {
public:
    virtual void SetWidth(double w);
    virtual void SetHeight(double h);
};
void Square::SetWidth(double w){
    Rectangle::SetWidth(w);
    Rectangle::SetHeight(w);
}
void Square::SetHeight(double h){
    Rectangle::SetHeight(h);
    Rectangle::SetWidth(h);
}
---- End Of File: ./rsl/square.cpp
```

Далее, автор статьи не без основания утверждает, что в приведенном примере в функции *LSPV* так нарушается принцип подстановки:

```
---- File: ./rsl/violation.cpp
```

```
void LSPV(Rectangle& r){
    r.SetWidth(5);
    r.SetHeight(4);
    assert(r.GetWidth() * r.GetHeight() == 20);
}
---- End Of File: ./rsl/violation.cpp
```

Вызывает возражение не слишком хорошая формулировка: расплывчатость термина *подстановки-замещения* (хотя в данном примере это понятно, в программу *LSPV* передается ссылка на объект подкласса), непонятность термина *поведение программы* и, соответственно, *изменение поведения программы* и так далее.

Попробуем проанализировать пример с точки зрения методов работы *RDG* [4] и придать точный теоретико-множественный смысл этим и некоторым другим терминам. Для записи спецификаций будем использовать язык формальных спецификаций *RSL* [5].

2. Определения

Начнем с определения термина типа. За основу возьмем определение Бертрана Мейера, данное термину *абстрактный тип данных* (АТД) [6, стр.113]. Спецификация АТД состоит из четырех разделов: типы; сигнатуры функций; аксиомы, описывающие типы; аксиомы, описывающие функции (в том числе и аксиомы-предусловия частично определенных функций).

Далее, сама спецификация будет называться типом. Доменом $Dom(X)$ типа X будет называться множество всех элементов, удовлетворяющих спецификации.

При описании примера на языке формальных спецификаций *RSL* [5], в разделе типа (*type*) определим обозначения домена типа *Figure* и дополнительный домен *URational* - это множество всех рациональных чисел, больших нуля.

В разделе величин (*value*) определим сигнатуры функций. Из всего набора функций выделим функции-генераторы (*generator*, на выходе функции есть обозначение домена типа) и функции-наблюдатели (*observer*, на выходе функции нет обозначения домена типа). Особенно важную роль играют функции, не выводимые из других функций спецификации.

В разделе аксиом (*axiom*) - аксиомы, описывающие попарное применение невыводимых функций-генераторов и функций-наблюдателей.

В простых и привычных случаях, когда это не приводит к путанице, домен типа можно

называть типом. Например, можно называть типом прямое произведение двух множеств $A \times B$, подразумевая, что есть спецификация функций проекции. Обозначение $A \times B$, мыслимое без функций проекции, – это домен типа, $A \times B$, мыслимое вместе с аксиомами функций проекции, – это тип.

Далее, уточним следующее определение Мейера [6, стр.122]: класс – абстрактный тип данных, снабженный некоторой, возможно частичной, реализацией. Раз класс – это реализация типа, то тип естественно считать спецификацией класса. Текст спецификации, то есть типа, в которой произведена замена аксиом, описывающих попарное поведение функций, на частично рекурсивные функции, будет называться аппликативной реализацией. Текст с классом на языке программирования L , который удовлетворяет требованиям спецификации, будет называться (обычно императивной) L -реализацией.

3. Спецификация примера

Вопросы единственности типа, полноты типа (в смысле полноты системы аксиом), противоречивости типа (в смысле противоречивости системы аксиом), единственности реализации, оптимальности спецификации и реализаций, вопросы синтаксического сахара RSL и др. не рассматриваются.

Попытаемся описать типы упомянутых выше C++ реализаций *Rectangle* и *Square* на языке формальных спецификаций RSL согласно принятому в RDG методу [4]. Дополнительный домен $UReal$ (то есть, все вещественные значения, большие 0) вводится, чтобы функции были всюду определенными и не надо было заниматься предусловиями.

3.1. Тип *Rectangle*

Аксиомы Rgw_sw и Rgh_sh очевидные: что положил, то и вернул. Две другие аксиомы Rgw_sh и Rgh_sw означают взаимную независимость высоты от ширины в значениях из множества *Figure* по спецификации *Rectangle*. Например, для любой фигуры f : *Figure*, значения, возвращаемые функцией *GetWidth*, не зависят от применения функции *SetHeight*.

```
---- File:./rsl/rectangle.rsl
scheme Rectangle = class
  type
    Figure,
    UReal = { | r: Real :- r > 0.0 | }
  value
```

```
SetWidth : Figure >< UReal → Figure,
SetHeight : Figure >< UReal → Figure,
GetWidth : Figure → UReal,
GetHeight : Figure → UReal
```

axiom

```
[Rgw_sw]
  all w: UReal, f: Figure:- GetWidth(SetWidth(f,
w)) = w,
[Rgw_sh]
  all h: UReal, f: Figure:- GetWidth(SetHeight(f,
h)) = GetWidth(f),
[Rgh_sh]
  all h: UReal, f: Figure:-
GetHeight(SetHeight(f, h)) = h,
[Rgh_sw]
  all w: UReal, f: Figure:- GetHeight(SetWidth(f,
w)) = GetHeight(f)
end
---- End Of File:./rsl/rectangle.rsl
```

Аппликативная реализация типа *Rectangle* может иметь следующий вид:

```
---- File:./rsl/ar.rsl
scheme AR = class
  type
    Figure = UReal >< UReal, -- фигура - пара
    (высота, ширина)
    UReal = { | r: Real :- r > 0.0 | }
  value
    SetWidth : Figure >< UReal → Figure
    SetWidth ((h, w), v) is (h, v),
    SetHeight : Figure >< UReal → Figure
    SetHeight ((h, w), v) is (v, w),
    GetWidth : Figure → UReal
    GetWidth (h, w) is w,
    GetHeight : Figure → UReal
    GetHeight (h, w) is h
  end
  ---- End of File:./rsl/ar.rsl
```

В этой реализации доменом у типа *Rectangle* является множество *Figure*, которое объявляется прямым произведением $UReal \times UReal$, функции *GetHeight*, *GetWidth* – проекции на соответствующие сомножители.

3.2. Тип *Square*

В *Square*, предположительно, подтипе *Rectangle* аксиомы Rgw_sw и Rgh_sh имеют тот же смысл, что и ранее, а смысл аксиом Sgw_sh и Sgh_sw совершенно поменялся. Эти две последние аксиомы явно утверждают, что значения, возвращаемые функцией *GetWidth*, зависят от применения функции *SetHeight* и,

наоборот, *GetHeight* возвращает результат предыдущего использования *SetWidth*:

```
---- File:./rsl/square.rsl
scheme Square = class
  type
    Figure,
    UReal = {| r: Real :- r > 0.0 |}
  value
    SetWidth : Figure << UReal → Figure,
    SetHeight : Figure << UReal → Figure,
    GetWidth : Figure → UReal,
    GetHeight : Figure → UReal
  axiom
    [Sgw_sw]
      all w: UReal, f: Figure:- GetWidth(SetWidth(f,
w))= w,
    [Sgw_sh]
      all h: UReal, f: Figure:- GetWidth(SetHeight(f,
h))= h,
    [Sgh_sh]
      all h: UReal, f: Figure:-
GetHeight(SetHeight(f, h))= h,
    [Sgh_sw]
      all w: UReal, f: Figure:-
GetHeight(SetWidth(f, w))= w,
  end
---- End Of File:./rsl/square.rsl
```

Например, функция *GetWidth* возвращает то, что было передано в функцию *SetHeight*. Аппликативная реализация типа *Square*, записана в форме наследования:

```
---- File:./rsl/as.rsl
AR
scheme AS = extend hide SetWidth, SetHeight in
AR with class
  value
    SetWidth : Figure << UReal → Figure
    SetWidth ((h, w), v) is (v, v),
    SetHeight : Figure << UReal → Figure
    SetHeight ((h, w), v) is (v, v)
  end
---- End Of File:./rsl/as.rsl
```

Новый класс *AS* 'наследует' (*extend*) все из класса *AR*, при этом 'прячет' (*hide*) родительские функции *SetWidth*, *SetHeight* и объявляет свои.

4. Аппликативная реализация примера

Запишем аппликативную реализацию функции *LSPV* из примера Мартина (см. раздел I) на *RSL*. Текст этой функции мог бы выглядеть так:

```
---- File:./rsl/v.rsl
AS
scheme V = extend AS with class
  value
    LSPV : Figure << (Figure << UReal → Figure)
      → Unit
    LSPV ( r, setW) is
      let h = 4.0,
          w = GetWidth (SetHeight( setW(r,5.0),h))
      -- w = 4.0
      in
        if ( h * w = 20.0) then skip else chaos end
      end
    pre
      (all h: UReal :- GetWidth(SetHeight(r, h)) =
GetWidth(r)) ∧ -- [Rgw_sh]
      (all w: UReal :- GetWidth(setW(r, w)) = w )
      -- [Rgw_sw]
    end
---- End Of File:./rsl/v.rsl
```

Аппликативная реализация функции *LSPV* делает точно то же, что и C++ реализация. Эффект позднего связывания удастся достичь тем, что в *LSPV* вместе с величиной типа *Figure* передается функция *SetWidth* из схемы *Square*. Это второй параметр функции *LSPV*, который имеет функциональный тип $Figure \times UReal \rightarrow Ureal$.

```
---- File:./rsl/uv.rsl
V
scheme UV = extend V with class
  value
    rec : Figure
    test_case
      [usage]
        LSPV (rec, SetWidth)
  end
---- End Of File:./rsl/uv.rsl
```

Функция *LSPV* последовательно применяет функции *setW* и *SetHeight* к полученному на вход значению $r : Figure$ и, в случае, если произведение высоты r на длину r не совпадает с числом 20, вызывает никогда не завершающееся выражение (*chaos*). Для того, чтобы подчеркнуть наличие ошибки, к функции, всюду определенной согласно сигнатуре, приписано предположение, означающее что функция написана в предположении аксиом спецификации *Rectangle* (а именно *Rgw_sh* и *Rgw_sw*).

Предусловие утверждает, что программист ожидает независимости координат (высоты и ширины) друг от друга:

```
pre
(all h: UReal :- GetWidth(SetHeight(r, h)) =
GetWidth(r)) ^ -- [Rgw_sh]
(all w: UReal :- GetWidth(setW(r, w)) = w)
-- [Rgw_sw]
```

На деле, поскольку в функцию *LSPV* была передана функция *SetWidth* из схемы *AS* - реализации *Square* (аналогичная функция из схемы *AR* - реализации *Rectangle* была скрыта), значение $w * h$ будет равно 16. То есть приводит к попаданию *LSPV* на случай *chaos*, что означает нарушение спецификации. Тогда, в данном контексте, выражение 'изменение поведения функции' можно трактовать как нарушение спецификации.

Ожидалось, что *LSPV* – это всюду определенная функция, но для функции *SetWidth* из схемы *AS* она 'изменила свое поведение' и её вычисление перестало завершаться.

Строго говоря, аргументация Мартина, почему его пример является настоящей проблемой, выглядит не слишком убедительно: «So here is the real problem: Was the programmer who wrote that function justified in assuming that changing the width of a Rectangle leaves its height unchanged? Clearly, the programmer of *LSPV* made this very reasonable assumption».

Теперь у нас настоящая проблема: должен ли программист, написавший функцию, быть осуждаем в его предположении, что изменение ширины *Rectangle* не изменяет его высоту? Ясно, что программист функции *LSPV* сделал осмысленное предположение.

То есть, Мартин считает, что программист осуждаем быть не должен. Совершенно очевидно, что нет никакой проблемы, и что программист должен делать только те предположения, которые записаны в спецификации и не делать никаких предположений от себя. Кроме того, (если рассуждать уже совсем формально) без наличия спецификации можно утверждать, что рассмотренная C++ реализация функции *LSPV* при получении на вход переменной a : *Square* сделала именно то, что требовалось – а именно аварийно завершила работу (*assert*). И именно этого и хотел программист. Поэтому нет никакой возможности говорить о каком-либо изменении поведения *LSPV*.

Вот если бы была написана хотя бы частичная спецификация этой функции, хотя бы было указано что *LSPV* – всюду определенная функция (*LSPV* : *Rectangle* $\rightarrow$ *Unit*), а при получении a : *Square* она аварийно завершила работу, то это была бы действительно проблема. Так как домен типа *Square* входит в домен типа *Rectangle*, то оказывается что функция *LSPV* не является полностью определенной, что влечет несоответствие спецификации.

Далее, если говорить неформально, то наличие аппликативной реализации и C++ реализации, приводящих к одинаковым трудностям, говорит о том, что корень проблемы находится не в языке реализации.

5. Уточнение терминов

Под термином *выделение типа* (*subtyping*) будем понимать добавление в спецификацию новых аксиом, не противоречащих первоначальным аксиомам.

Исходная спецификация будет называться надтипом, спецификация, расширенная новыми аксиомами, будет называться подтипом. То есть, под выделением типа будем понимать уточнение спецификации.

Посмотрим, что произойдет при попытке добавить к типу *Rectangle* аксиомы типа *Square*. Рассмотрим аксиомы *Rgw_sh* и *Sgw_sh*. Одну из *Rectangle*:

```
[Rgw_sh]
all h: UReal, f: Figure:-
GetWidth(SetHeight(f, h)) = GetWidth(f)
```

Вторую из *Square*:

```
[Sgw_sh]
all h: UReal, f: Figure:- GetWidth(SetHeight(f, h))
= h
```

И запишем их вместе, соединив конъюнкцией, в виде следующей аксиомы:

```
all h: UReal, f: Figure:-
h = GetWidth(SetHeight(f, h)) ^
GetWidth(SetHeight(f, h)) = GetWidth(f)
в связи с общей частью GetWidth(SetHeight(f, h))
получаем
```

```
all h: UReal, f: Figure :- h = GetWidth(f)
```

Возьмем в *UReal* значение w , причем $w \neq h$. Затем, раз f может быть любое, то, используя аксиому *Rgw_sw*, возьмем такое f , у которого

ширина была задана равной $w(f) = \text{GetWidth}(f1, w)$. Получаем: $h = \text{GetWidth}(f) = \text{GetWidth}(\text{SetWidth}(f1, w)) = w$.

Имеем противоречие. Это означает, что две различные аксиомы *Rgw_sh* и *Sgw_sh* не могут выполняться вместе. Отсюда следует, что нет никакой возможности в принципе считать *Square* подтипом *Rectangle*. Можно считать их 'братьями', каждый из которых является подтипом некоторого другого надтипа.

Это же заключение можно сделать и из наблюдения, что пример можно было написать наоборот. Сначала написать C++ -реализацию *Square*, из которой позже пронаследовать C++ -реализацию *Rectangle*.

Было бы совершенно странно иметь в языке возможность записать наследование реализации надтипа из реализации подтипа. Пока, в свете предыдущих договоренностей, принцип подстановки Лисков может трактоваться следующим образом: пусть *T* и *S* некоторые классы. Если любая программа, использующая обращения к переменной *t*: *T*, продолжает удовлетворять своей спецификации при присвоении *t* значения переменной *s*: *S*, то тип класса *S* является подтипом типа класса *T*.

6. Отношение натуральных и целых

Попробуем посмотреть на типы — спецификации двух очень похожих классов: *Uint* — реализация натуральных чисел и *Int* — реализация целых чисел, обладающих практически одинаковым набором операций. Затем проверим список их аксиом на совместимость как и в примере Мартина.

Спецификация множества натуральных чисел принадлежит Пеано, схема на *RSL* взята из [7, стр. 51]. Наличие или отсутствие нуля среди натуральных чисел не является принципиальным и является вопросом трактовки (см. [8, стр. 48]). Так же, с целью уменьшения громоздкости, удалены неиспользуемые аксиома порядка и операция умножения:

```
---- File:./rsl/peano.rsl
scheme PEANO =
class
type
N          -- обозначение домена типа
value
zero : N,   -- завели величину zero 0
succ : N → N -- функция следования
succ(n) = n+1
axiom
[first_is_zero] -- n+1 ~ 0
```

```
all n : N :- -- для каждого n из N
~(succ(n) is zero), -- применение succ(n) не
--есть zero
[induction] -- аксиома индукции
all p : N → Bool:- -- для любого предиката
(p(zero) ∧ (all n : N :- p(n) => p(succ(n))))
=>
(all n : N :- p(n))
end
---- End Of File:./rsl/peano.rsl
```

К аксиомам Пеано добавим операцию сложения.

```
---- File:./rsl/nat.rsl
PEANO -- наследование схемы PEANO
scheme NAT = extend PEANO with
class
value
plus : N >< N → N
axiom
[plus_zero] -- n + 0 = n
all n : N :- plus(n, zero) is n,
[plus_succ]
all n1, n2 : N :- -- n1 + (n2+1) = (n1 + n2)+1
plus(n1, succ(n2)) is succ(plus(n1, n2))
end
---- End Of File:./rsl/nat.rsl
```

Чтобы получить спецификацию целых чисел, добавим функцию взятия обратного элемента и сопутствующие ей аксиомы:

```
---- File:./rsl/z.rsl
NAT
scheme Z = extend NAT with
class
value
minus : N → N
axiom
[minus_zero] -- (-0) = 0
minus(zero) = zero,
[plus_minus] -- (-n) + n = 0
all n : N :- plus(minus(n), n) is zero,
[plus_minus_mminus]
all n1, n2 : N :- -- (-n1)+(-n2) = -(n1+n2)
plus(minus(n1), minus(n2)) is minus(plus(n1,
n2)),
[minus_minus] -- -(-n) = n
all n : N :- minus(minus(n)) is n
end
---- End Of File:./rsl/z.rsl
```

Рассмотрим значение *succ(zero)*. Во-первых, по аксиоме *plus_minus*:

$$\text{plus}(\text{minus}(\text{succ}(\text{zero})), \text{succ}(\text{zero})) \text{ is zero}$$

$$\text{-- } (-1) + 1 = 0.$$

Далее, по аксиоме *plus_succ* поменяем порядок вызова функций *succ* и *plus*:

*plus(minus (succ(zero)), succ(zero)) is
succ(plus (minus (succ(zero)), zero))
-- ((-1)+0) + 1 = 0.*

Осталось по *plus_zero* удалить сумму и получить утверждение, противоречащее аксиоме *first_is_zero*:

*succ(plus (minus (succ(zero)), zero)) is -- (-1) + 1 = 0
succ(minus (succ(zero)))*

minus(succ(zero)) является таким *n* из *N*, что применение к нему функции *succ* дает *zero*. Противоречие и явное несоответствие принципу подстановки - замещения. Любая работающая программа, написанная в терминах класса *UInt*, (а значит и такая, которая написана в предположении *first_is_zero*), должна продолжать работать, если ей на вход поставляется любой объект из класса *Int*. Например такой, для которого аксиома *first_is_zero* выполняться не будет. Существование таких объектов гарантируется согласно спецификации типа целых чисел. Это означает что ни тип *Z* не может быть подтипом типа *Nat*, ни тип *Nat* не может быть подтипом типа *Z*.

Рассмотрим подробнее, что происходит с доменами типа в наших примерах. В рассмотренных реализациях домен *Figure*, удовлетворяющий типу *Square* – это множество пар одинаковых неотрицательных рациональных чисел (обозначим *Figure_{Square}*), а домен *Figure*, удовлетворяющий *Rectangle* – это множество всех пар неотрицательных рациональных (обозначим *Figure_{Rectangle}*). То есть, *Figure_{Square}* является подмножеством *Figure_{Rectangle}*. В случае натуральных и целых *N_{Nat}* является подмножеством *N_Z*. Кроме того, заметим, что в обоих примерах, наследование можно записывать как *Rectangle* от *Square* (а *Int* от *UInt*), так и наоборот.

Получаем, что при построении из некоторого надтипа *A* подтипа *B* можно получить три случая:

- пока неинтересный случай, когда домен типа остается неизменным.
- домен подтипа 'увеличивается': $Dom(A) \subset Dom(B)$;
- домен подтипа 'уменьшается': $Dom(A) \supset Dom(B)$.

По аналогии с примером Мартина рассмотрим случай уменьшения домена на примере натуральных целых. Это значит, что сначала написали спецификацию *Z*, в предположении что

функция *succ(minus(succ(zero)))* дает *zero*. Потом, в соответствии со спецификацией написали пример *LSPV 3*:

---- File:./rsl/v3.rsl

Z

scheme V3 = extend Z with class
value

LSPV3 : $N \times (N \rightarrow N) \rightarrow Unit$

LSPV3 (a, suc) is

let one = suc(zero)

in

if a = one $\wedge$ suc (minus(a)) $\sim$ zero then

chaos else skip end

end

pre

suc(minus(suc(zero))) = zero,

LSPVM : $N \rightarrow N$

LSPVM (a) is minus(a)

end

---- End Of File:./rsl/v3.rsl

Далее попробовали получить как подтип спецификацию *Nat*, добавляя в нее аксиому *zero_is_first*. Потом его реализацию *UInt*, в которой:

- *succ* никогда не возвращает *zero*;
- отсутствует реализация *minus*.

После чего оказывается, что либо функция *LSPVM* испортит значения подкласса (нарушит инвариант), либо функция *LSPV3* не сможет завершить свою работу, получив в качестве фактических параметров *succ(zero)* и *UInt :: succ*. Создается ситуация, в точности аналогичная ранее рассмотренной с *LSPV*.

7. Пересмотр проблемы

Теперь можно вспомнить, что было первой трудностью в разборе примера Мартина. Ею оказалось то, что объект *s : Square*, рассматриваемый как принадлежащий типу надкласса, после выполнения метода надкласса нельзя рассматривать как принадлежащий типу подкласса. Ибо после вызова методов надкласса (вследствие раннего связывания объекта и методов класса) оказывалось нарушено условие равенства сторон объекта *Square* (инвариант *Square*). Но необходимость сохранять инвариант *s* есть, только при желании присвоения значения переменной типа *Rectangle* переменной типа *Square*. Именно это влечет обязательность выполнения инварианта *Square*.

То есть, главное, что ожидается от пары надкласс и подкласс – это возможность точного (без преобразования значения) прямого и

обратного присвоения значения по цепочке подкласс - надклас - применение метода - подкласс. Слово 'точное' важно. К примеру, на практике регулярно выполняется неточное преобразование значений из целых в рациональные и обратно.

Пусть есть класс A , в котором объявлена функция $f: Dom(A) \times X \rightarrow Dom(A)$ (далее $A :: f$), и его наследник - подкласс B с функцией $f: Dom(B) \times X \rightarrow Dom(B)$ (далее $B :: f$), для некоторого множества X . Причем, одно из множеств строго включается во второе. Будем считать, что соответствующая функция, заданная на большем множестве, вообще говоря, может вырабатывать значения не попадающие в меньшее множество. Пусть объявлены переменная a из класса A , и переменная b из класса B . Рассмотрим, что может происходить при выполнении последовательности операторов:

$a = b;$
 $a.f(x);$
 $b = a;$

Всего получаем четыре ситуации:

- В случае увеличения домена ($Dom(A) \subseteq Dom(B)$) точное начальное присвоение $a = b$ представляется проблематичным. Не каждое значение переменной b может быть присвоено переменной a . В таком случае оказывается невозможным использовать функции надкласса и все равно требуется выполнение всех аксиом надтипа.
- Случай уменьшения домена ($Dom(A) \supseteq Dom(B)$) и раннего связывания. То есть, при обращении к f - $a.f(x)$ используется функция $A :: f(x)$. Можно свободно присваивать значение $a = b$. Но для некоторого x получаем $a.A :: f(x)$ не принадлежит $Dom(B)$, что делает невозможным обратное присвоение значения $b = a$.

Примечание. По-видимому, это достаточное, но не необходимое условие. В случае, если $Dom(B)$ является чем-то вроде идеала во множестве $Dom(A)$, когда для функции $A :: g: Dom(A) \times Dom(A) \rightarrow Dom(A)$ и для любого b из $Dom(B)$ и любого a из $Dom(A)$ применение $A :: g(b, a)$ будет принадлежать $Dom(b)$, оказывается возможным обратное присвоение.

- Случай уменьшения домена и позднего связывания. То есть, при обращении к f - $a.f(x)$ используется функция $B :: f(x)$.

Можно свободно присвоить значение $a = b$. Для любых значений x , $a.B :: f(x)$ принадлежит $Dom(B)$, возможно обратное присвоение $b = a$. Вопрос состоит в том, чтобы функция $B :: f$ удовлетворяла всем аксиомам типа A .

- В случае, когда домен типа не меняется, можно использовать и родительскую функцию $A :: f$, и дочернюю функцию $B :: f$, если она удовлетворяет аксиомам типа A .

8. Заключение

Осталось сформулировать следующее наблюдение: во-первых, есть два текста: некоторая формальная математическая система, в которой записываются типы – спецификации, и язык программирования L , в котором записывается программа; во-вторых, есть четыре операции:

- выделение подтипа - *subtyping*;
- наследование (образование подкласса) - *inheritance*;
- L -реализация спецификации (записывание программы на языке L) - *realization*;
- восстановление спецификации по программе - *specification*.

Принцип подстановки Лисков показывает, при каких условиях операции 'реализация', 'образование класса', 'восстановление спецификации' будут приводить к тем же результатам, что и операция 'выделение подтипа', то есть, окажутся в некотором смысле коммутативными (рис. 1).

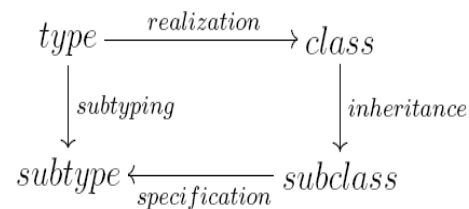


Рис. 1. Выделение подтипов и наследование

8.1. Настоящий надтип классов *Square* и *Rectangle*

Запишем не полностью определенный тип – настоящий родитель обоих классов с удаленными аксиомами Rgw_sh , Rgh_sw :

```

---- File:./rsl/realdad.rsl
scheme RealDad = class
  type
    Figure,
    UReal = { | r: Real :- r > 0.0 | }
  value
    SetWidth : Figure >< UReal → Figure,
    SetHeight : Figure >< UReal → Figure,

```

```

GetWidth : Figure → UReal,
GetHeight : Figure → UReal
axiom
  [gw_sw]
    all w: UReal, f: Figure:- GetWidth(SetWidth(f,
w)) = w,
  [gh_sh]
    all h: UReal, f: Figure:-
GetHeight(SetHeight(f, h)) = h
end
---- End Of File:./rsl/realdad.rsl

```

C++ -реализация которого может выглядеть следующим образом:

```

---- File:./rsl/realdad.cpp
class RealDad{
public:

```

```

virtual void SetWidth(double w)=0;
virtual void SetHeight(double h)=0;
double GetHeight() const {return itsHeight;}
double GetWidth() const {return itsWidth;}
private:
  double itsWidth;
  double itsHeight;
};
---- End Of File:./rsl/realdad.cpp

```

Для сохранения свойства быть подтипом, оба класса *Square* и *Rectangle* должны наследоваться от *RealDad*, который и должен использоваться для написания полиморфных функций вроде *LSPV* в качестве класса формального параметра. Собственно, саму программу *LSPV* предъявлять в качестве контрпримера будет нельзя, так как в связи с удаленными аксиомами нельзя будет предполагать, что произведение извлеченной длины и ширины даст 20.

Список использованных источников

1. Dines Bjørner. Software Engineering 1: Abstraction and Modelling / Dines Bjørner / [ISBN 3-540-21149-7]. – Springer, 2005. – 714 p.
2. Luca Cardelli, Peter Wegner. On Understanding Types, Data Abstraction, and Polymorphism. / Luca Cardelli, Peter Wegner // Computing Surveys. – December 1985. – Vol. 17. – № 4. – P. 471–522.
3. Robert C.Martin. The Liskov Substitution Principle / Robert C.Martin. // C++ Report. – March 1996.
4. The RAISE Method Group. The RAISE Development Method // BCS Practitioner Series [ISBN 0-13-752700-4]. – Prentice Hall. –1995.
5. Chris George. Introduction to RAISE. / Chris George. – UNU-IIST report. – 2002. – No. 249.
6. Bertrand Meyer. Object-Oriented Software Construction / Bertrand Meyer. – Prentice Hall. [ISBN 0-13-629155-4]. – 1997.
7. The RAISE Method Group. The RAISE SPECIFICATION LANGUAGE. – Prentice Hall Europe, Denmark. – 1992.
8. Арнольд И. В. Теоретическая арифметика / И. В.Арнольд. – М.: Учпедгиз, 1938. –399 с.

References

1. DINES BJØRNER. (2005) *Software Engineering 1: Abstraction and Modelling (Texts in Theoretical Computer Science. An EATCS Series)*. Springer. [ISBN 3-540-21149-7](#).
2. LUCA CARDELLI, PETER WEGNER. (1985) *On Understanding Types, Data Abstraction, and Polymorphism*. Computing Surveys, December 198, Vol 17 n. 4, pp 471-522.
3. ROBERT C.MARTIN. (1996) *The Liskov Substitution Principle*. C++ Report, March 1996.
4. The RAISE Method Group. (1995) *The RAISE Development Method*. BCS Practitioner Series. Prentice Hall. ISBN 0-13-752700-4.
5. CHRIS GEORGE. (2002) *Introduction to RAISE*. UNU-IIST report No.249.
6. BERTRAND MEYER. (1997) *Object-Oriented Software Construction*. Prentice Hall, ISBN 0-13-629155-4.
7. The RAISE Method Group. (1992) *The RAISE SPECIFICATION LANGUAGE*. Prentice Hall Europe, Denmark.
8. ARNOLD, I.V.. (1938) *Theoretical arithmetic*. Moskva.

Надійшла до редколегії 15.09.15

УДК 519.2

Савкіна М.Ю., к. ф.-м. н., с.н.с.

Алгоритм перевірки на коректність моделі двофазної нелінійної регресії

Інститут математики НАНУ, 01601, м.Київ,
вул.Терещенківська, 3.
E-mail:marta@imath.kiev.ua

M.Yu.Savkina, PhD., Senior Scientific
Researcher

The algorithm of checking for correctness of two-phase nonlinear regression model

Institute of mathematics of NASU, 01601, Kyiv,
Tereschenkovskaya, 3.
E-mail:marta@imath.kiev.ua

Отримано в явному вигляді формули для оцінок параметрів та залишкової суми квадратів моделі двофазної регресії з відомою точкою перемикавання. Побудовано алгоритм перевірки на коректність моделі двофазної регресії з невідомою точкою перемикавання.

Ключові слова: метод найменших квадратів, регресійна модель, точка перемикавання

Formulas for parameter estimates and residual sum of squares for two-phase regression model with a known point switch are obtained in explicit form. The parameter estimates of model are presented in a linear combination of values of the response y_i ; residual sum of squares is presented in a quadratic form of the values of the response y_i . The coefficients for linear combination and quadratic form are found as a functions of i , k and n , where $n + 1$ — quantity of the values of the response, k — number of the knot point in which the switch point is located. The algorithm of checking for correctness of two-phase regression model with unknown point switch is constructed. The algorithm is based on the general principles of statistical hypothesis testing in regression analysis. Testing of hypothesis for equality of the unknown parameter to zero is carried out by using the likelihood ratio criterion, which determines to accept or reject the hypothesis by the ratio of the sum of squared deviations caused this hypothesis to the residual sum of squares of the two-phase regression model with the unknown switch point.

Key Words: least square method, regression model, point switch

Статтю представив д.т.н., проф. Кудін В.І.

1. Вступ

Існує багато задач, які потребують вивчення впливу певних факторів $x_1, x_2, \dots, x_k$ на кількісну характеристику y якогось об'єкта або явища. Для розв'язання таких задач використовується регресійний аналіз. Зазвичай $x_1, x_2, \dots, x_k$ називають незалежними змінними або регресорами, y — вихідною змінною або відкликом. Нехай між незалежними та вихідною змінними існує лінійний зв'язок. Регресійний аналіз базується на припущенні, що із-за впливу різних неврахованих факторів та випадковостей залежність y від $x_1, x_2, \dots, x_k$ буде більш або менш відрізнятися від лінійної, тобто її доречно подати в вигляді

$$y = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_kx_k + \epsilon, \quad (1)$$

де ϵ — випадкове відхилення. Таким чином маємо лінійну регресійну модель (1). Величини $a_1, a_2, \dots, a_k$ називають параметрами моделі; вони невідомі та завдяки наявності ϵ в рівнянні регресії не можуть бути знайдені точно. Для їх визначення застосовуються статистичні методи дослідження невідомих параметрів: точкове та інтервальне оцінювання.

Для того, щоб отримати точкові оцінки параметрів $a_1, a_2, \dots, a_k$, слід призвести реєстрацію n значень y та кожного фактору x_j , $j = 1, 2, \dots, k$, одночасно, тобто при конкретних значеннях факторів $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ik}$ отримати значень y_i , $i = 1, 2, \dots, n$, $n > k$.

Найпоширенішим методом оцінювання невідомих параметрів в регресійному аналізі є метод найменших квадратів (МНК), який полягає в мінімізації суми

$$\sum_{i=0}^n (y_i - a_1 x_{i1} - a_2 x_{i2} - \dots - a_k x_{ik})^2$$

відносно $a_1, a_2, \dots, a_k$.

Позначимо

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} \end{pmatrix}.$$

Якщо $\text{rang } X = k$, то оцінка МНК $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \dots, \hat{a}_k$ параметрів $a_1, a_2, \dots, a_k$ єдина, та її можна знайти за формулою

$$\vec{a}^{(\wedge)} = (X^T X)^{-1} X^T \vec{y}, \quad (2)$$

де

$$\vec{a}^{(\wedge)} = (\hat{a}_1, \hat{a}_2, \dots, \hat{a}_k)^T, \quad \vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T.$$

Мінімальне значення суми квадратів відхилень

$$S_k^2 = \sum_{i=0}^n (y_i - \hat{a}_1 x_{i1} - \hat{a}_2 x_{i2} - \dots - \hat{a}_k x_{ik})^2 \quad (3)$$

називається залишковою сумою квадратів.

Класичний регресійний аналіз заснований на тому, що вигляд моделі (1) відомий з точністю до параметрів, тобто набір незалежних змінних (факторів) заданий однозначно, всі істотні змінні присутні та ніяких альтернативних способів вибору факторів немає. Насправді вибір регресорів, тісно пов'язаний з вибором моделі об'єкта - одна з найскладніших проблем. Поява ЕОМ в середині минулого сторіччя значно спростила цю проблему. "...Поступово з'ясувалося, що ЕОМ допускає відмову від жорсткої моделі дослідження та підбір під час обробки даних деякої "найкращої" моделі..." [1]. Крім того, раніше припускалося, "що вже реалізований експеримент, виконаний за деяким планом. "Таким чином, задача зводилася до вибору найкращої процедури обробки даних. "...Останнім часом отримує розвиток новий підхід, в рамках якого запропоновано одночасно вибирати найкращу тріаду: модель-план-метод оцінювання, що

відповідає наскільки можливо розглянутій задачі..."[1]

2. Модель двофазної регресії. Задача перевірки моделі на коректність

Розглянемо модель регресії

$$y_i = at_i + b + c_1(t_i - t^*)_+ + \epsilon_i, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad (4)$$

де $\epsilon_0, \dots, \epsilon_n$ - незалежні у сукупності нормально розподілені випадкові величини з $E\epsilon_i = 0$ та $D\epsilon_i = \sigma^2$, а $(t_i - t^*)_+$ - зрізана степенева функція [2]. Згідно з [3] точка t^* називається точкою перемикавання моделі. Якщо вона відома, модель (4) є лінійною по параметрах a, b, c_1 , які підлягають оцінюванню. Якщо t^* невідома, модель стає нелінійною по параметрах, а t^* перетворюється на невідомий параметр моделі, який також треба оцінювати.

Крім того, висуваємо гіпотезу $c_1 = 0$. Якщо вона підтвердиться з великою ймовірністю, фактор $(t - t^*)_+$ видаляємо з регресії, тобто модель (4) перетвориться на таку модель

$$y_i = at_i + b + \epsilon_i, \quad i = 0, 1, \dots, n. \quad (5)$$

Для регресійної моделі (5) формула (2) для оцінок МНК параметрів a, b перетворюється на такі співвідношення [3]

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=0}^n y_i(t_i - \bar{t})}{\sum_{i=0}^n (t_i - \bar{t})^2}, \quad \hat{b} = \bar{Y} - \hat{a}\bar{t},$$

де

$$\bar{Y} = \sum_{i=0}^n y_i, \quad \bar{t} = \sum_{i=0}^n t_i,$$

а залишкова сума квадратів дорівнює

$$S_2^2 = \sum_{i=0}^n (y_i - \bar{Y})^2 - \hat{a}^2 \sum_{i=0}^n (t_i - \bar{t})^2.$$

3. Формули для оцінок МНК параметрів моделі двофазної регресії з відомою точкою перемикавання

Нехай відомо, що $t^* = t_k$. Позначимо $\hat{a}^{(k)}, \hat{b}^{(k)}, \hat{c}_1^{(k)}$ оцінки МНК параметрів a, b, c_1 моделі (4) в цьому випадку.

Теорема. Нехай $t_i = \frac{i}{n}, i = 0, 1, \dots, n$.
 Тоді де

$$\hat{c}_1^{(k)} = \alpha^{(k)} \sum_{i=0}^n \beta_i^{(k)} \gamma_i^{(k)} y_i, \quad (6) \quad \Delta_1 = \begin{vmatrix} \sum_{i=0}^n (t_i^2 - \bar{t}^2) & \sum_{i=0}^n y_i (t_i - \bar{t}) \\ \sum_{i=0}^n (t_i - \bar{t}) \tau_{ik} & \sum_{i=0}^n (y_i - \bar{Y}) \tau_{ik} \end{vmatrix},$$

$$\hat{a}^{(k)} = 12\delta \sum_{i=0}^n \rho_i y_i - \lambda^{(k)} \delta^{(k)} \eta^{(k)} \hat{c}_1^{(k)}, \quad (7)$$

$$\hat{b}^{(k)} = \bar{Y} - 6\delta \sum_{i=0}^n \rho_i y_i + \frac{k}{n} \delta^{(k)} \eta^{(k)} \hat{c}_1^{(k)}, \quad (8) \quad \Delta = \begin{vmatrix} \sum_{i=0}^n (t_i^2 - \bar{t}^2) & \sum_{i=0}^n (t_i - \bar{t}) \tau_{ik} \\ \sum_{i=0}^n (t_i - \bar{t}) \tau_{ik} & \sum_{i=0}^n \tau_{ik}^2 - \frac{1}{n} (\sum_{i=0}^n \tau_{ik})^2 \end{vmatrix},$$

де

$$\beta_i^{(k)} = \begin{cases} \frac{1}{k(k+1)}, & \text{якщо } i = 0, 1, \dots, k, \\ \frac{1}{(n-k)(n-k+1)}, & \text{якщо } i = k+1, \dots, n, \end{cases} \quad (9)$$

$$\gamma_i^{(k)} = \begin{cases} kn - i(2k + n + 2), & \text{якщо } i = 0, 1, \dots, k, \\ (k - 2n - 2)n - i(2k - 3n - 2), & \text{якщо } i = k+1, \dots, n, \end{cases} \quad (10)$$

$$\rho_i = \frac{i}{n} - \frac{1}{2}, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad (11)$$

$$\alpha^{(k)} = \frac{6n}{(2k+1)n + 2(k^2 - 1)}, \quad (12)$$

$$\delta = \frac{n}{(n+1)(n+2)}, \quad (13)$$

$$\lambda^{(k)} = \frac{n+2k+2}{n}, \quad (14)$$

$$\eta^{(k)} = \frac{(n-k)(n-k+1)}{n}. \quad (15)$$

Доведення. Позначимо $\tau_{ik} = (t_i - t_k)_+$.
 Якщо $t^* = t_k$, оцінки МНК $\hat{a}^{(k)}, \hat{b}^{(k)}, \hat{c}_1^{(k)}$ параметрів a, b, c_1 можна знайти як розв'язок системи лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^n (y_i - \hat{a}^{(k)} t_i - \hat{b}^{(k)} - \hat{c}_1^{(k)} \tau_{ik}) = 0 \\ \sum_{i=0}^n (y_i - \hat{a}^{(k)} t_i - \hat{b}^{(k)} - \hat{c}_1^{(k)} \tau_{ik}) t_i = 0 \\ \sum_{i=0}^n (y_i - \hat{a}^{(k)} t_i - \hat{b}^{(k)} - \hat{c}_1^{(k)} \tau_{ik}) \tau_{ik} = 0 \end{cases},$$

з якої отримаємо

$$\hat{c}_1^{(k)} = \frac{\Delta_1}{\Delta},$$

$$\hat{a}^{(k)} = (t_i^2 - \bar{t}^2)^{-1} \left[\sum_{i=0}^n y_i (t_i - \bar{t}) - \hat{c}_1^{(k)} \sum_{i=k+1}^n (t_i - \bar{t}) \tau_{ik} \right],$$

$$\hat{b}^{(k)} = \bar{Y} - \hat{a}^{(k)} \bar{t} - \frac{\hat{c}_1^{(k)}}{n+1} \sum_{i=k+1}^n \tau_{ik}.$$

Далі, у випадку $t_i = \frac{i}{n}, i = 0, 1, \dots, n$,

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} \frac{(n+1)(n+2)}{12n} & \sum_{i=0}^n y_i \rho_i^{(k)} \\ \frac{(n-k)(n-k+1)(n+2k+2)}{12n^2} & \sum_{i=k}^n (y_i - \bar{Y}) \varrho_i^{(k)} \end{vmatrix},$$

де $\varrho_i^{(k)} = \frac{i-k}{n}, i = k, \dots, n$, а $\rho_i^{(k)}$ визначається за формулою (11),

$$\Delta = (n-k)(n-k+1).$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} \frac{(n+1)(n+2)}{12n} & \frac{(n-k)(n-k+1)(n+2k+2)}{12n^2} \\ \frac{n+2k+2}{12n^2} & \frac{(n^2 + (2k+3)n - 3k^2 - k + 2)}{12n^2(n+1)} \end{vmatrix}.$$

Після низки перетворень маємо

$$\Delta_1 = \frac{1}{12n^3}.$$

$$\begin{aligned} & \cdot \left(\sum_{i=0}^k y_i [(n-k)(n-k+1)(kn - i(2k+n+2))] + \right. \\ & \left. + \sum_{i=k+1}^n y_i [k(k+1)((k-2n-2)n - i(2k-3n-2))] \right); \end{aligned}$$

$$\Delta = \frac{2k(k+1)(n-k)(n-k+1)}{(12n^2)^2}.$$

$$\cdot ((2k+1)n + 2(k^2 - 1)).$$

Таким чином маємо

$$\begin{aligned} \hat{c}_1^{(k)} &= \frac{6n}{(2k+1)n + 2(k^2 - 1)} \cdot \left(\frac{1}{k(k+1)} \sum_{i=0}^k y_i [kn - i(2k+n+2)] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(n-k)(n-k+1)} \cdot \sum_{i=k+1}^n y_i [(k-2n-2)n - i(2k-3n-2)] \right), \\ \hat{a}^{(k)} &= \frac{12n}{(n+1)(n+2)} \sum_{i=0}^n y_i \left(\frac{i}{n} - \frac{1}{2} \right) - \\ &\quad - \frac{(n-k)(n-k+1)(n+2k+2)}{n(n+1)(n+2)} \hat{c}_1^{(k)}, \\ \hat{b}^{(k)} &= \bar{Y} - \frac{6n}{(n+1)(n+2)} \sum_{i=0}^n y_i \left(\frac{i}{n} - \frac{1}{2} \right) + \\ &\quad + \frac{k(n-k)(n-k+1)}{n(n+1)(n+2)} \hat{c}_1^{(k)}. \end{aligned}$$

В отриманих для $\hat{a}^{(k)}, \hat{b}^{(k)}, \hat{c}_1^{(k)}$ формулах вводимо позначення (9)-(15). Отримаємо формули (6),(7),(8).

Теорему доведено.

Залишкову сумою квадратів для моделі (4) з відомою точкою перемикавання можна подати у вигляді

$$T(k) = \sum_{i=0}^n (y_i - \hat{a}^{(k)} t_i - \hat{b}^{(k)} - \hat{c}_1^{(k)} (t_i - t_k)_+)^2. \quad (16)$$

Наслідок. Має місце рівність

$$\begin{aligned} T(k) &= \sum_{i=0}^n (y_i - \bar{Y})^2 - 12\delta \left(\sum_{i=0}^n \rho_i y_i \right)^2 + \\ &\quad + 2\hat{c}_1^{(k)} A_1(k) + (\hat{c}_1^{(k)})^2 A_2(k), \end{aligned} \quad (17)$$

де

$$A_1(k) = \frac{\eta^{(k)}}{2} \bar{Y} + \eta^{(k)} \lambda^{(k)} \delta \left(\sum_{i=0}^n \rho_i^{(k)} y_i \right) -$$

$$- \sum_{i=0}^n \rho_i^{(k)} y_i,$$

$$A_2(k) = \frac{(\eta^{(k)})^2}{12(n+1)} \left((\lambda^{(k)})^2 \frac{n}{n+2} + 3 \right) + \frac{\eta^{(k)} \mu^{(k)}}{6}.$$

Доведення. Підставимо (6),(7),(8) в (16). Після низки перетворень отримаємо (17).

4. Отримання оцінки МНК точки перемикавання в нелінійному випадку

В роботі [4] розроблено алгоритм отримання оцінки МНК $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}_1, \hat{t}^*$ параметрів a, b, c_1, t^* нелінійної моделі (4) за скінченну кількість кроків.

Розглянемо відрізок $[t_k, t_{k+1}]$.

Згідно алгоритму, якщо оцінка МНК $\hat{t}^*$ параметра t^* належить (t_k, t_{k+1}) , то її можна знайти як точку перетину двох прямих $a^{(k)}t + b^{(k)}$ та $c^{(k)}t + d^{(k)}$, перша з яких мінімізує суму

$$\sum_{i=0}^k (y_i - a^{(k)} t_i - b^{(k)})^2 \text{ відносно } a^{(k)}, b^{(k)},$$

інша - суму

$$\sum_{i=k+1}^n (y_i - c^{(k)} t_i - d^{(k)})^2 \text{ відносно } c^{(k)}, d^{(k)}.$$

Якщо прямі $a^{(k)}t + b^{(k)}$ та $c^{(k)}t + d^{(k)}$ не перетинаються на інтервалі (t_k, t_{k+1}) , то оцінка МНК $\hat{t}^*$ не належить цьому інтервалу.

1-й крок алгоритма. Для $k = 1, 2, \dots, n-2$ будуємо прямі $a^{(k)}t + b^{(k)}$ та $c^{(k)}t + d^{(k)}$ та знаходимо їх точку перетину $\hat{t}_k^*$; якщо вона належить (t_k, t_{k+1}) , покладемо

$$\begin{aligned} S(k) &= \sum_{i=0}^k (y_i - \bar{Y}_1^{(k)})^2 + \sum_{i=k+1}^n (y_i - \bar{Y}_2^{(k)})^2 - \\ &\quad - (a^{(k)})^2 \sum_{i=0}^k (t_i - \bar{t}_1^{(k)})^2 - (c^{(k)})^2 \sum_{i=k+1}^n (t_i - \bar{t}_2^{(k)})^2, \end{aligned}$$

де

$$\bar{Y}_1^{(k)} = \sum_{i=0}^k y_i, \quad \bar{Y}_2^{(k)} = \sum_{i=k+1}^n y_i,$$

$$\bar{t}_1^{(k)} = \sum_{i=0}^k t_i, \quad \bar{t}_2^{(k)} = \sum_{i=k+1}^n t_i;$$

інакше

$$S(k) = \infty.$$

Таким чином, отримаємо послідовність $S(1), S(2), \dots, S(n-2)$.

2-й крок алгоритма. Знайдемо в послідовності $S(1), S(2), \dots, S(n-2)$ всі пари $(S(k_l - 1), S(k_l))$, $l = 0, 1, \dots, j$, такі що $S(k_l - 1) = \infty$, $S(k_l) = \infty$.

Вважаємо $t^* = t_{k_l}$, $l = 0, 1, \dots, j$, та знаходимо $T(k_l)$ за формулою (17); отримаємо другу послідовність $T(k_1), T(k_2), \dots, T(k_j)$.

Кожному значенню $S(k) < \infty$ відповідає точка t_k^* , кожному значенню $T(k_l)$ - точка t_{k_l} . Оцінкою МНК $\hat{t}^*$ параметра t^* нелінійної регресійної моделі (3) буде та точка t_k^* або t_{k_l} , яка відповідає значенню

$$S_4^2 = \min\{S(1), S(2), \dots, S(n-2),$$

$$T(k_1), T(k_2), \dots, T(k_j)\}.$$

Далі, в випадку $t_i = \frac{i}{n}$, $i = 0, 1, \dots, n$, маємо

$$\hat{a} = 12\delta \sum_{i=0}^n \rho_i y_i, \quad \hat{b} = \bar{Y} - \frac{1}{2}\hat{a}, \quad (18)$$

$$S_2^2 = \sum_{i=0}^n (y_i - \bar{Y})^2 - 12\delta \left(\sum_{i=0}^n \rho_i y_i \right)^2. \quad (19)$$

$$a^{(k)} = \frac{12n\delta}{k} \sum_{i=0}^k y_i \left(\frac{i}{n} - \frac{k}{2n} \right), \quad (20)$$

$$c^{(k)} = \frac{12n}{(n-k-1)\eta^{(k)}} \sum_{i=k+1}^n y_i \left(\frac{i}{n} - \frac{n+k+1}{2n} \right), \quad (21)$$

$$S(k) = \sum_{i=0}^k (y_i - \bar{Y}_1^{(k)})^2 + \sum_{i=k+1}^n (y_i - \bar{Y}_2^{(k)})^2 -$$

$$- \frac{12n\delta}{k} \left(\sum_{i=0}^k y_i \left(\frac{i}{n} - \frac{k}{2n} \right) \right)^2 -$$

$$- \frac{12n}{(n-k-1)\eta^{(k)}} \left(\sum_{i=k+1}^n y_i \left(\frac{i}{n} - \frac{n+k+1}{2n} \right) \right)^2. \quad (22)$$

5. Алгоритм прийняття (або відхилення) гіпотези $c_1 = 0$ у випадку невідомої точки перемикавання

Розглянемо тепер задачу перевірки простої статистичної гіпотези

$$H : c_1 = 0.$$

Критерій відношення правдоподібності перевірки гіпотези H приводить до множини прийняття гіпотези [5]

$$E_H = \{y \in R^{n+1} : \frac{S_2^2 - S_4^2}{S_4^2} \leq \varphi\}.$$

Значення φ для нелінійної регресії можна вибрати різними методами. Один з них співпадає з методом вибору в лінійній регресії. Припустимо, модель лінійній регресії має m невідомих параметрів, а гіпотеза H_0 складається з p лінійних рівнянь. Задамося рівнем значущості α та знайдемо для нього відповідне значення $F_\alpha(p, n+1-m)$ наступним чином. Позначимо $f(t, p, n+1-m)$ - щільність розподілу Фішера з p та $n+1-m$ ступенями свободи та знайдемо таке $F_\alpha = F_\alpha(p, n+1-m)$, що $\int_{F_\alpha}^\infty f(t, p, n+1-m) dt = \alpha$; значення F_α знаходять з таблиць. Покладемо

$$\varphi = \frac{p}{n+1-m} F_\alpha(p, n+1-m).$$

В нашому випадку $m = 4$ (модель має 4 невідомі параметри), та $p = 1$ (гіпотеза H складається з одного рівняння), тобто

$$\varphi = \frac{1}{n-3} F_\alpha(1, n-3).$$

1) Знаходимо $\hat{a}, \hat{b}, S_2^2$ за формулами (18), (19);
2) Знаходимо $M_1 = \max\{|y_0 - \hat{b}|, |y_n - \hat{a} - \hat{b}|\}$; якщо

$$\frac{M_1^2}{S_2^2 - M_1^2} \geq \varphi, \quad (23)$$

гіпотезу $c_1 = 0$ відхиляємо, інакше переходимо до 3).

3) Знаходимо

$$M_2 = \max\{|y_i - \hat{a}\frac{i}{n} - \hat{b}|, i = 1, \dots, n-1\}.$$

Нехай $M_2 = |y_l - \hat{a}\frac{l}{n} - \hat{b}|$, тобто найбільшого значення величина $|y_i - \hat{a}\frac{i}{n} - \hat{b}|$ досягає при $i = l, 1 \leq l \leq n-1$.

Знаходимо $T(l)$ за формулою (14);

якщо

$$\frac{T(l)}{S_2^2 - T(l)} \geq \varphi, \quad (24)$$

гіпотезу $c_1 = 0$ відхиляємо, інакше переходимо до 3).

4) Для $k = 1, \dots, n-1$:

знаходимо $\hat{a}^{(k)}, \hat{b}^{(k)}$ за формулами (8),(9); якщо виконується нерівність

$$\left| (c^{(k)} - a^{(k)})^{-1} \left(\bar{Y}_1^{(k)} - \bar{Y}_2^{(k)} - \frac{c^{(k)}}{2} \left(1 + \frac{1}{n} \right) \right) - \frac{k}{2n} \right| < \frac{1}{n},$$

знаходимо $S(k)$ за формулою (10), інакше покладемо $S(k) = \infty$.

5) Знаходимо $T(k_1), T(k_2), \dots, T(k_j)$ за формулою (14).

6) Знаходимо S_4^2 . Якщо

$$\frac{S_2^2 - S_4^2}{S_4^2} \geq \varphi, \quad (25)$$

гіпотезу $c_1 = 0$ відхиляємо, інакше приймаємо.

З а у в а ж е н н я. З нерівностей (23),(24) відразу випливає (25), тому що

$$M_1^2 < S_2^2 - S_4^2, T(l) < S_2^2 - S_4^2.$$

Якщо нерівності (23),(24) не виконуються, найвірогідніше гіпотеза $c_1 = 0$ буде прийнята. Прийняття цієї гіпотези може відбутися тільки на кроці 6); відхилення гіпотези швидше за все станеться на кроці 2) або 3), тому в цьому випадку шукати S_4^2 не треба.

Список використаних джерел

1. Дрейпер Н. Прикладной регрессионный анализ / Н. Дрейпер, Г. Смит. — Москва: Финансы и статистика, 1986. — 366 с.
2. Завьялов Ю.С. Методы сплайн-функций / Ю.С. Завьялов, Б.И. Квасов, В.Л. Мирошников. — Москва: Наука, 1980. — 352 с.
3. Себер Дж. Линейный регрессионный анализ / Дж. Себер. — Москва: Мир, 1980. — 456 с.
4. Hudson Derek J. Fitting Segmented Curves Whose Join Points Have to Be Estimated / Derek J. Hudson // JASA. — 1966. — v.61. — N.316. — P.1097–1129.
5. Демиденко Е.З. Линейная и нелинейная регрессии / Е.З. Демиденко. — Москва: Финансы и статистика, 1981. — 304 с.

References

1. DRAPER N., SMITH H. (1986) Applied regression analysis. Moscow: Finansy and statistika.
2. ZAV'YALOV Y.S., KVASOV B., MIROSHNICHENKO V. (1980). Methods of spline functions. Moscow: Science.
3. SEBER G. (1980) Linear regression analysis. Moscow: Mir.
4. HUDSON D. (1966) Fitting Segmented Curves Whose Join Points Have to Be Estimated. JASA. 61(316). p.1097–1129.
5. DEMIDENKO E.Z. (1981) Linear and nonlinear regressions. Moscow: Finansy and statistika.

Надійшла до редколегії 18.09.2015.

УДК 519.853.6

Страхов Є. М.¹, к. ф.-м. н.,
Яровий А. Т.², к. ф.-м. н., доц.

Трикроковий метод для задачі багатовимірної оптимізації

¹ Одеський національний університет імені
І. І. Мечникова, 65082, м. Одеса, вул.
Дворянська, 2,
e-mail: swebus86@gmail.com

² Одеський національний університет імені
І. І. Мечникова, 65082, м. Одеса, вул.
Дворянська, 2,
e-mail: ouek@onu.edu.ua

E. M. Strakhov¹, Ph. D.,
A. T. Yarovyy², Ph. D.

A Three-Term Method for Unconstrained Optimization

¹ Odessa I. I. Mechnikov National University, 65082,
Odessa, Dvoryanska str., 2,
e-mail: swebus86@gmail.com

² Odessa I. I. Mechnikov National University, 65082,
Odessa, Dvoryanska str., 2,
e-mail: ouek@onu.edu.ua

У статті розглянуто трикроковий метод для розв'язування задач безумовної мінімізації функцій багатьох змінних. Доведено, що даний метод належить до методів спряжених напрямків. Проведено чисельний експеримент, який показує більшу ефективність запропонованого алгоритму порівняно із класичним двокроковим методом спряжених градієнтів.

Ключові слова: трикроковий метод, спряжені напрямки, задача безумовної оптимізації.

We consider an unconstrained minimization problem with a continuously differentiable function. Conjugate gradient methods (e. g. Fletcher – Reeves algorithm, Polak – Ribiere – Polyak algorithm) are very efficient for this branch of optimization. In this paper we suggest a three-term type modification of the classical conjugate gradient algorithm. Note that this modification needs the same number of function and gradient evaluations as the two-term method. We prove that the descent directions evaluated by the algorithm are conjugate for a quadratic function. Further we construct a minimization algorithm for nonquadratic functions. Some numerical results attained by our method are presented. These results demonstrate the advantages of three-term type algorithm. Namely, it requires less iteration to achieve greater accuracy. However, these benefits are less noticeable for large-scale problems. The study of three-term methods can be further generalized to the general case of k-term conjugate directions methods.

Key Words: three-term method, conjugate directions, unconstrained optimization.

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

Вступ

На сучасному етапі розвитку науки та комп'ютерних технологій теорія чисельних методів нелінійного програмування є досить розвиненою. Проте при виборі алгоритму для розв'язування конкретної реальної задачі дослідникам доводиться у значній мірі покладатися на досвід та інтуїцію. Це пов'язано з тим, що досить важко дати чіткі рекомендації щодо застосування того чи іншого методу; немає й «універсальних» методів, які можна було б використати у будь-якій ситуації. Тому теорія методів оптимізації продовжує розвиватися, з'являються нові методи, які мають свої переваги у порівнянні з попередніми.

У загальному вигляді задача нелінійного програмування (або задача оптимізації) полягає у визначенні екстремального значення деякої функції на допустимій множині, яка визначається набором обмежень. У випадку відсутності обмежень маємо задачу безумовної оптимізації. Такі задачі мають як самостійне прикладне значення, так і можуть використовуватися як допоміжні при розв'язуванні задач з обмеженнями та більш складних проблем.

Традиційно чисельні методи безумовної оптимізації поділяють на методи нульового (не потребують обчислення похідних від цільової функції), першого (використовується тільки перша похідна) та другого (відповідно, друга

похідна) порядків. Окремим класом серед них є методи спуску. Вони мають ітераційну природу, тобто виходячи з деякої початкової точки будують послідовні наближення до точки мінімуму (максимуму), використовуючи напрямки спуску, тобто зменшення (зростання) функції. Щодо побудови цих напрямків розроблено різні підходи, які і визначають подальшу класифікацію методів. Зокрема, ті методи, які при побудові напрямків спуску використовують лише інформацію поточної ітерації, називають однокроковими. Якщо використовується додатково інформація попереднього кроку, то двокроковими, і т. д. Класичним двокроковим методом є метод спряжених градієнтів.

Розглянемо задачу

$$\varphi(x) \rightarrow \min, x \in R^n, \quad (1)$$

де $\varphi(x) : R^n \rightarrow R^1$ є неперервно диференційовною функцією. Позначимо її градієнт через $\varphi'(x)$.

Метод спряжених градієнтів має такий загальний вигляд:

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k + \beta_k s^k, k = 0, 1, \dots, \\ s^k &= \begin{cases} -\varphi'(x^k), & k = 0, \\ -\varphi'(x^k) + \gamma_{k-1} s^{k-1}, & k = 1, 2, \dots \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

де $x^0, x^1, \dots, x^k, \dots$ — послідовні наближення, $s^0, s^1, \dots, s^k, \dots$ — напрямки спуску, β_k — величина кроку вздовж напрямку спуску, γ_{k-1} — числовий параметр.

Одним із можливих варіантів вибору кроку β_k є розв'язування задачі одновимірної мінімізації:

$$\beta_k : \min_{\beta \geq 0} \varphi(x^k + \beta s^k). \quad (3)$$

На практиці також використовується вибір β_k з умов Вольфе [5]:

$$\begin{aligned} \varphi(x^k + \beta_k s^k) - \varphi(x^k) &\leq \delta \beta_k [\varphi'(x^k)]^T s^k, \\ [\varphi'(x^k + \beta_k s^k)]^T s^k &\geq \sigma [\varphi'(x^k)]^T s^k, \end{aligned}$$

де $0 < \delta \leq \sigma < 1$ — деякі константи.

Практичні дослідження доводять, що якість розв'язку вихідної задачі (1) та швидкість

збіжності алгоритму суттєво залежать від якості розв'язку одновимірної задачі (3).

Різновиди методу (2) визначаються способом обчислення параметру γ_{k-1} , зокрема

$$\begin{aligned} \gamma_{k-1} &= \frac{\|\varphi'(x^k)\|^2}{\|\varphi'(x^{k-1})\|^2} \quad (\text{метод Флетчера — Рівза}); \\ \gamma_{k-1} &= \frac{(\varphi'(x^k), \varphi'(x^k) - \varphi'(x^{k-1}))}{\|\varphi'(x^{k-1})\|^2} \quad (\text{метод} \end{aligned}$$

Полака — Ріб'єра — Поляка)

та інші. Тут і далі $\|\cdot\|$ означає евклідову норму вектора, а $(\cdot, \cdot)$ — скалярний добуток векторів.

Метод спряжених градієнтів вважається досить ефективним для задач великої розмірності. Він у більшій мірі порівняно із однокроковими градієнтними методами враховує геометричні властивості цільової функції. Недоліком методу є чутливість до похибок обчислень, особливо при великій кількості змінних.

Зважаючи на переваги двокрокових методів перед однокроковими, можна очікувати, що врахування інформації, отриманої не тільки на попередньому, $(k-1)$ -му, кроці, а й на $(k-2)$ -му, дозволить побудувати ще більш ефективний алгоритм.

Теоретичні положення методу

Отже, повернемося до задачі нелінійного програмування (1). Для її розв'язання розглянемо трикроковий метод з таким алгоритмом:

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k + \beta_k s^k, k = 0, 1, \dots, \\ s^k &= \begin{cases} -\varphi'(x^k), & k = 0, \\ -\varphi'(x^k) + \xi_{k-1} s^{k-1}, & k = 1, \\ -\varphi'(x^k) + \xi_{k-1} s^{k-1} + \gamma_{k-2} s^{k-2}, & k = 2, 3, \dots \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

де, як і раніше, $x^0, \dots, x^k, \dots$ — послідовні наближення, $s^0, \dots, s^k, \dots$ — напрямки спуску, $\beta_k, \xi_{k-1}, \gamma_{k-2}$ — числові параметри. Крок β_k будемо визначати з умови (3).

Означення. [2] Вектори s' і s'' називаються спряженими (відносно матриці A), якщо вони відмінні від нуля і $(As', s'') = 0$. Вектори $s^0, s^1, \dots, s^k$ називаються взаємно спряженими (відносно матриці A), якщо всі вони відмінні від нуля і $(As^i, s^j) = 0, i \neq j, 0 \leq i, j \leq k$. Матриця

А вважається симетричною і додатно означеною ($A > 0$).

Розглянемо деякі властивості методу за умови, що функція $\varphi(x)$ є квадратичною

$$\varphi(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x) + c. \quad (5)$$

Побудуємо систему взаємно спряжених напрямків за правилом (4).

$$0 = (s^k, As^{k-1}) = -(\varphi'(x^k), As^{k-1}) + \xi_{k-1}(s^{k-1}, As^{k-1}) + \gamma_{k-2}(s^{k-2}, As^{k-1}).$$

Звідси

$$\xi_{k-1} = \frac{(\varphi'(x^k), As^{k-1})}{(s^{k-1}, As^{k-1})}. \quad (6)$$

Знаменник у (6) не дорівнює нулеві, так як матриця A додатно означена.

Далі,

$$0 = (s^k, As^{k-2}) = -(\varphi'(x^k), As^{k-2}) + \xi_{k-1}(s^{k-1}, As^{k-2}) + \gamma_{k-2}(s^{k-2}, As^{k-2}).$$

Отримаємо

$$\gamma_{k-2} = \frac{(\varphi'(x^k), As^{k-2})}{(s^{k-2}, As^{k-2})}. \quad (7)$$

Теорема 1. Для диференційовної функції $\varphi(x)$ послідовність $\{x^k\}$, що побудована за (4), (6), (7), така, що

$$(\varphi'(x^{k+1}), s^k) = 0, \quad k = 0, 1, \dots \quad (8)$$

Доведення. Враховуючи (4), отримаємо $Ax^{k+1} = Ax^k + \beta_k As^k$; разом з $\varphi'(x) = Ax + b$ маємо

$$\varphi'(x^{k+1}) = \varphi'(x^k) + \beta_k As^k. \quad (9)$$

З (3) отримаємо, що при $\beta_k > 0$

$$\left. \frac{d}{d\beta} \varphi(x^k + \beta s^k) \right|_{\beta=\beta_k} = 0,$$

а при $\beta_k = 0$

$$\left. \frac{d}{d\beta} \varphi(x^k + \beta s^k) \right|_{\beta=0} \geq 0.$$

Якщо $\beta_k > 0$, то

$$0 = \left. \frac{d}{d\beta} \varphi(x^k + \beta s^k) \right|_{\beta=\beta_k} = (\varphi'(x^k + \beta_k s^k), s^k) = (\varphi'(x^{k+1}), s^k).$$

Отже, $(\varphi'(x^{k+1}), s^k) = 0$.

Доведення того, що співвідношення (8) справедливе і при $\beta_k = 0$, проведемо за індукцією. Маємо

$$0 \leq \left. \frac{d}{d\beta} \varphi(x^0 + \beta s^0) \right|_{\beta=0} = (\varphi'(x^1), s^0) = -\|\varphi'(x^0)\|^2,$$

звідки отримаємо рівність $(\varphi'(x^1), s^0) = 0$.

Нехай $(\varphi'(x^k), s^{k-1}) = 0$ і доведемо, що $(\varphi'(x^{k+1}), s^k) = 0$ при $\beta_k = 0$. Так як $x^{k+1} = x^k$, то маємо, враховуючи (9)

$$\begin{aligned} 0 &\leq \left. \frac{d}{d\beta} \varphi(x^k + \beta s^k) \right|_{\beta=0} = \\ &= (\varphi'(x^{k+1}), s^k) = (\varphi'(x^k), s^k) = \\ &= (\varphi'(x^k), -\varphi'(x^k) + \xi_{k-1}s^{k-1} + \gamma_{k-2}s^{k-2}) = \\ &= -\|\varphi'(x^k)\|^2 + \gamma_{k-2}(\varphi'(x^k), s^{k-2}) = \\ &= -\|\varphi'(x^k)\|^2 + \gamma_{k-2}(\varphi'(x^{k-1}) + \beta_{k-1}As^{k-1}, s^{k-2}) = \\ &= -\|\varphi'(x^k)\|^2 + \gamma_{k-2}(\varphi'(x^{k-1}), s^{k-2}) + \\ &+ \gamma_{k-2}\beta_{k-1}(As^{k-1}, s^{k-2}) = -\|\varphi'(x^k)\|^2 \leq 0. \end{aligned}$$

Отримали $(\varphi'(x^{k+1}), s^k) = 0$. Теорему доведено.

Доведемо, що метод (4), (6), (7) відноситься до методів спряжених напрямків.

Теорема 2. Вектори $\varphi'(x^k)$ і $\varphi'(x^{k+1})$ ортогональні, $k = 0, 1, \dots$

Доведення. Відомо [2], що квадратична функція (5) досягає мінімального значення при

$$\beta_k = -\frac{(\varphi'(x^k), s^k)}{(As^k, s^k)}. \quad (10)$$

Тоді, враховуючи (9) і (10), отримаємо

$$\begin{aligned} &(\varphi'(x^{k+1}), \varphi'(x^k)) = \\ &= \left(\varphi'(x^k) - \frac{(\varphi'(x^k), s^k)}{(As^k, s^k)} As^k, \varphi'(x^k) \right) = \end{aligned}$$

$$= (\varphi'(x^k), \varphi'(x^k)) - \frac{(\varphi'(x^k), s^k)}{(As^k, s^k)} (As^k, \varphi'(x^k)).$$

Розглянемо $(\varphi'(x^k), s^k)$. Отже,

$$\begin{aligned} (\varphi'(x^k), s^k) &= -(\varphi'(x^k), \varphi'(x^k)) + \\ &+ \xi_{k-1}(\varphi'(x^k), s^{k-1}) + \gamma_{k-2}(\varphi'(x^k), s^{k-2}) = \\ &= -(\varphi'(x^k), \varphi'(x^k)) + \gamma_{k-2}(\varphi'(x^k), s^{k-2}). \end{aligned}$$

Далі, враховуючи (9), маємо $(\varphi'(x^k), s^{k-2}) =$
 $= (\varphi'(x^{k-1}), s^{k-2}) + \beta_{k-1}(As^{k-1}, s^{k-2}) = 0$.

Тоді

$$(\varphi'(x^k), s^k) = -(\varphi'(x^k), \varphi'(x^k)). \quad (11)$$

Маємо

$$\begin{aligned} (As^k, s^k) &= -(As^k, \varphi'(x^k)) + \xi_{k-1}(As^k, s^{k-1}) + \\ &+ \gamma_{k-2}(As^k, s^{k-2}) = -(As^k, \varphi'(x^k)). \end{aligned} \quad (12)$$

З урахуванням (11) і (12) отримаємо

$$\begin{aligned} (\varphi'(x^{k+1}), \varphi'(x^k)) &= (\varphi'(x^k), \varphi'(x^k)) - \\ &- \frac{(\varphi'(x^k), \varphi'(x^k))}{-(As^k, \varphi'(x^k))} (As^k, \varphi'(x^k)) = 0. \end{aligned}$$

Теорему доведено.

Теорема 3. Нехай $x^0 \in R^n$, точки $x^1, \dots, x^{n-1}$ і вектори $s^0, s^1, \dots, s^{n-1}$ отримані за формулами (4), (6), (7) і $\varphi'(x^k) \neq 0$ ($i = 0, \dots, n-1$). Тоді вектори $s^0, s^1, \dots, s^{n-1}$ взаємно спряжені, а градієнти $\varphi'(x^0), \varphi'(x^1), \dots, \varphi'(x^{n-1})$ взаємно ортогональні.

Доведення. Теорему будемо доводити методом математичної індукції. Ортогональність векторів $\varphi'(x^0)$ і $\varphi'(x^1)$ отримаємо за теоремою 2. Вектор $s^0 \neq 0$ за умовою, s^1 теж не дорівнює нулеві, інакше $s^1 = -\varphi'(x^1) - \beta_0 \varphi'(x^0) = 0$, а це неможливо, враховуючи ортогональність $\varphi'(x^0)$ і $\varphi'(x^1)$. Спряженість s^0 і s^1 отримаємо за (6) і (7).

Припустимо, що $k \leq n-1$, вектори $s^0, s^1, \dots, s^{k-1}$ взаємно спряжені, а градієнти $\varphi'(x^0), \dots, \varphi'(x^{k-1})$ взаємно ортогональні. Тоді

за теоремою 2 $(\varphi'(x^k), \varphi'(x^{k-1})) = 0$. При $i \leq k-2$, використовуючи (9), індукцію та (4), маємо

$$\begin{aligned} (\varphi'(x^k), \varphi'(x^i)) &= \\ &= (\varphi'(x^{k-1}), \varphi'(x^i)) + \beta_{k-1}(As^{k-1}, \varphi'(x^i)) = \\ &= \beta_{k-1}(As^{k-1}, -s^i + \xi_{i-1}s^{i-1} + \gamma_{i-2}s^{i-2}) = 0. \end{aligned}$$

Отже, доведена взаємна ортогональність векторів $\varphi'(x^0), \varphi'(x^1), \dots, \varphi'(x^{n-1})$.

Вектор $s^k \neq 0$, інакше з (4) отримали б, що вектори $\varphi'(x^0), \dots, \varphi'(x^k)$ лінійно залежні, що суперечить їх взаємній ортогональності. Доведемо, що $s^0, \dots, s^k$ взаємно спряжені.

Дійсно, $(s^k, As^{k-1}) = 0$ за (6), (7).

Враховуючи (10), маємо

$$\begin{aligned} \beta_i &= -\frac{(\varphi'(x^i), -\varphi'(x^i) - \xi_{i-1}\varphi'(x^{i-1}) - \dots)}{(As^i, s^i)} = \\ &= \frac{(\varphi'(x^i), \varphi'(x^i))}{(As^i, s^i)}, \end{aligned}$$

і тому $\beta_i \neq 0$, $i \leq k$. Тоді з (9) отримаємо

$$As^i = \frac{\varphi'(x^{i+1}) - \varphi'(x^i)}{\beta_i}. \quad (13)$$

При $i \leq k-2$, використовуючи (4), індукцію, (13) та доведену взаємну ортогональність градієнтів, отримаємо

$$\begin{aligned} (s^k, As^i) &= (-\varphi'(x^k) + \xi_{k-1}s^{k-1} + \gamma_{k-2}s^{k-2}, As^i) = \\ &= -\left(\varphi'(x^k), \frac{\varphi'(x^{i+1}) - \varphi'(x^i)}{\beta_i}\right) = 0. \end{aligned}$$

Теорему доведено.

Отже, розглянутий метод (4), (6), (7) належить до методів спряжених напрямків.

Сформулюємо тепер трикроковий метод для мінімізації неквадратичних функцій. Для цього перетворимо формули (6) і (7) так, щоб до них не входила матриця A .

Перетворимо ξ_{k-1} :

$$\xi_{k-1} = \frac{(\varphi'(x^k), As^{k-1})}{(s^{k-1}, As^{k-1})} =$$

$$\begin{aligned} &= \frac{(\varphi'(x^k), \varphi'(x^k) - \varphi'(x^{k-1}))}{(s^{k-1}, \varphi'(x^k) - \varphi'(x^{k-1}))} = \\ &= \frac{(\varphi'(x^k), \varphi'(x^k) - \varphi'(x^{k-1}))}{(-\varphi'(x^{k-1}) - \xi_{k-2}\varphi'(x^{k-2}) + \dots, \varphi'(x^k) - \varphi'(x^{k-1}))} = \\ &= \frac{(\varphi'(x^k), \varphi'(x^k) - \varphi'(x^{k-1}))}{\|\varphi'(x^{k-1})\|^2}. \end{aligned}$$

Далі аналогічно отримаємо

$$\begin{aligned} \gamma_{k-2} &= \frac{(\varphi'(x^k), As^{k-2})}{(s^{k-2}, As^{k-2})} = \\ &= \frac{(\varphi'(x^k), \varphi'(x^{k-1}) - \varphi'(x^{k-2}))}{\|\varphi'(x^{k-2})\|^2}. \end{aligned}$$

Отже, для неквадратичних функцій будемо використовувати трикроковий метод (4), де крок β_k визначається з умови (3), а параметри ξ_{k-1} , γ_{k-2} обчислюються наступним чином:

$$\xi_{k-1} = \frac{(\varphi'(x^k), \varphi'(x^k) - \varphi'(x^{k-1}))}{\|\varphi'(x^{k-1})\|^2}, \quad (14)$$

$$\gamma_{k-2} = \frac{(\varphi'(x^k), \varphi'(x^{k-1}) - \varphi'(x^{k-2}))}{\|\varphi'(x^{k-2})\|^2}. \quad (15)$$

Обчислювальний експеримент

Зробимо аналіз роботи описаного трикрокового методу порівняно із класичним методом спряжених градієнтів. Для порівняння використаємо такі показники, як точність отриманого розв'язку та кількість проведених ітерацій. Під кількістю ітерацій будемо розуміти кількість отриманих послідовних наближень до розв'язку задачі. Зауважимо, що кількість обчислень значень функції та її градієнту у трикроковому методі не змінюється порівняно із двокроковим.

Наведемо результати розрахунків для декількох тестових задач [3, 4]. Обчислення проводилися із точністю $\varepsilon = 10^{-6}$. Критерій зупинки процесу обчислень полягав у одночасному виконанні трьох умов:

$$\begin{aligned} &\|\varphi(x^{k-1}) - \varphi(x^k)\| < \varepsilon(1 + \|\varphi(x^k)\|), \\ &\|x^{k-1} - x^k\| < \sqrt{\varepsilon}(1 + \|x^k\|), \\ &\|\varphi'(x^k)\| \leq \sqrt[3]{\varepsilon}(1 + \|\varphi(x^k)\|). \end{aligned}$$

Для розрахунків використовувалася відкрита система комп'ютерної математики Sage (www.sagemath.org).

Задача 1. Кількість змінних $n = 3$:

$$\varphi(x) = 100 \left[x_3 - \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right)^2 \right]^2 + (1 - x_1)^2 + (1 - x_2)^2,$$

початкові точки $x_0^1 = (-1.2, 2, 0)^T$, $\varphi(x_0^1) = 8.40$ та $x_0^2 = (-2, 2, 4)^T$, $\varphi(x_0^2) = 1610$; точний розв'язок задачі $x^* = (1, 1, 1)^T$, $\varphi(x^*) = 0$.

Таблиця 1

Результати обчислень для задачі 1

Початкова точка x_0^1	МСГ	Трикроковий метод
Значення функції	$3,27 \cdot 10^{-5}$	$9,78 \cdot 10^{-8}$
Норма градієнту	0,0086	0,0042
К-ть ітерацій	150	34

Задача 2. Функція Пауелла, кількість змінних $n = 4$:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + \\ &+ (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4, \end{aligned}$$

початкові точки $x_0^1 = (3, -1, 0, 1)^T$, $\phi(x_0^1) = 215$ та $x_0^2 = (1, 1, 1, 1)^T$, $\phi(x_0^2) = 125$; точний розв'язок задачі $x^* = (0, 0, 0, 0)^T$, $\phi(x^*) = 0$.

Таблиця 2

Результати обчислень для задачі 2

Початкова точка x_0^1	МСГ	Трикроковий метод
Значення функції	$1,05 \cdot 10^{-5}$	$2,32 \cdot 10^{-8}$
Норма градієнту	0,0094	0,0009
К-ть ітерацій	58	33

Задача 3. Узагальнена функція Розенброка, кількість змінних n :

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^{n/2} \left[(1 - x_{2i-1})^2 + 100(x_{2i} - x_{2i-1}^2)^2 \right],$$

початкова точка $x_0 = (-1.2, 1, -1.2, 1, \dots)^T$, точний розв'язок задачі $x^* = (1, \dots, 1)^T$, $\phi(x^*) = 0$.

Таблиця 3

Результати обчислень для задачі 3 при $n = 8$

Початкова точка x_0	МСГ	Трикроковий метод
Значення функції	$2,47 \cdot 10^{-6}$	$2,34 \cdot 10^{-6}$
Норма градієнту	0,0098	0,0056
К-ть ітерацій	152	60

Таблиця 4

Результати обчислень для задачі 3 при $n = 20$

Початкова точка x_0	МСГ	Трикроковий метод
Значення функції	$1,70 \cdot 10^{-6}$	$2,07 \cdot 10^{-6}$
Норма градієнту	0,00984	0,00978
К-ть ітерацій	283	268

Задача 4. Узагальнена функція Біла (Beale), кількість змінних $n = 100$:

$$\varphi(x) = \sum_{i=1}^{n/2} \left[(1.5 - x_{2i-1} (1 - x_{2i}))^2 + (2.25 - x_{2i-1} (1 - x_{2i}^2))^2 + (2.625 - x_{2i-1} (1 - x_{2i}^3))^2 \right],$$

початкова точка $x_0 = (1, 0.8, \dots, 1, 0.8)^T$.

Таблиця 5

Результати обчислень для задачі 4

Початкова точка x_0	МСГ	Трикроковий метод
Значення функції	$4,85 \cdot 10^{-8}$	$4,85 \cdot 10^{-8}$
Норма градієнту	0,00198	0,00198
К-ть ітерацій	11	8

Висновки

У роботі розглянуто трикроковий метод для задач безумовної мінімізації, обґрунтована його належність до методів спряжених напрямків. Результати обчислювальних експериментів для тестових функцій вказують на переваги запропонованого методу у порівнянні з класичним двокроковим методом спряжених градієнтів. При невеликій кількості змінних ($n \leq 20$) трикроковий алгоритм дає більш точний розв'язок при суттєво меншій кількості кроків. Для задач великої розмірності ($n = 100, 200$) вказані переваги також спостерігаються, але в

меншій мірі. Слід зазначити, що кількість обчислень функції та градієнту в обох методах однакова. Зважаючи на отримані результати, перспективним може бути дослідження властивостей загального k -крокового алгоритму.

Список використаних джерел

1. Карманов В. Г. Математическое программирование / В. Г. Карманов. — Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2004. — 264 с.
2. Сухарев А. Г. Курс методов оптимизации / А. Г. Сухарев, А. В. Тимохов, В. В. Федоров. — Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2005. — 368 с.
3. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование / Д. Химмельблау. — Москва: Мир, 1972. — 536 с.
4. Andrei N. An Unconstrained Optimization Test Functions Collection / N. Andrei // Advanced Modelling and Optimization. — 2008. — Vol. 10, No. 1. — P. 147–161.
5. Sun Z., Tian Y., Li H. Two Modified Three-Term Type Conjugate Gradient Methods and Their Global Convergence for Unconstrained Optimization [Електронний ресурс] / Zhongbo Sun, Yantao Tian, Hongyang Li // Mathematical Problems in Engineering. — 2014. — 9 Р. — Режим доступу до журн.: <http://dx.doi.org/10.1155/2014/394096>.

References

1. KARMANOV, V. (2004) *Matematicheskoe programmirovaniye*. Moskva: Fizmatlit.
2. SUKHAREV A., TIMOKHOV A., FEDOROV V. (2005) *Kurs metodov optimizatsii*. Moskva: Fizmatlit.
3. HIMMELBLAU D. (1972) *Prikladnoye nelineinoe programmirovaniye*. Moskva: Mir.
4. ANDREI, N. (2008) An Unconstrained Optimization Test Functions Collection. *Advanced Modeling and Optimization*. 10 (1). P. 147–161.
5. SUN Z., TIAN Y., LI H. (2014) Two Modified Three-Term Type Conjugate Gradient Methods and Their Global Convergence for Unconstrained Optimization. *Mathematical Problems in Engineering* [Online]. — Available from: <http://dx.doi.org/10.1155/2014/394096>.

Надійшла до редколегії 30.04.15

УДК 004.93

Тарануха В. Ю., асистент.

**Властивості згладженої n -грамної моделі
для слов'янських мов, заснованої на
класах**

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4д,
e-mail: taranukha@ukr.net

V. Y. Taranukha, assistant.

**Properties of smoothed class-based n -gram
model for Slavic languages**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: taranukha@ukr.net

Стаття присвячена дослідженню n -грамної моделі для розпізнавання слов'янських мов та властивостям методу згладжування, проаналізовано різні способи формування моделі та їх наслідки для оцінок якості.

Ключові слова: n -грамна модель мови, модель на класах, згладжування.

Статья посвящена исследованию n -грамной модели для распознавания славянских языков в свойствам метода сглаживания, проанализировано разные способы формирования модели и их результаты для оценок качества.

Ключевые слова: n -грамная модель языка, модель на классах, сглаживание.

The article investigates n -gram language model for Slavic language recognition. Idea of improvement is based on specific features of Slavic languages. Syntactic links in Slavic languages are built mostly with changing forms of words and much less with word order. It makes extended vocabularies with many wordforms for single meaningful word (or lemma). For the same number of meaningful words it expands transition matrix size. Given the same corpora size it reduces frequencies of most elements in the matrixes that represent model. This makes models designed on Markov chains and n -grams less reliable for Slavic language comparing to Germanic and Romance languages. Method of smoothing aimed for improvement of recognition rate is investigated. It is based on decomposition of wordform n -grams into n -grams based on grammatical classes and lemma classes. Different methods are used to reduce the model size. After reduction new model with smoothed pseudocounts is calculated based on decomposed model. Numerical tests were performed for different setups and different secondary smoothing techniques. They have shown minor improvements in entropy of the model thus implying improvements in recognition rate.

Key Words: n -gram language model, model reduction, class-based model, smoothing.

Статтю представив чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

Швидкий розвиток комунікаційних технологій призвів до зростання доступних обсягів даних в електронній формі. Частина з цих даних представлена у вигляді зображень документів та аудіозаписів, а не у вигляді текстових документів. Тому значна увага приділяється засобам, що дозволять перетворити зображення та аудіозаписи в текст. Розповсюдженою є модель, що спирається на марковські ланцюги, матриці яких зручно представляти у вигляді наборів n -грам[1]. За допомогою марковських

ланцюгів можна зручно оцінювати ймовірність появи ланцюжка з n слів у певному тексті. Проте при застосуванні такої моделі до слов'янських мов і, зокрема, до української виникають проблеми, що пов'язані з властивостями мови і вони роблять використання цієї моделі менш зручним, порівняно з використанням цієї ж моделі для романо-германських мов. Була розроблена спеціальна модель, щоби оцінювати ймовірності кращим чином спираючись на особливості саме української мови.

Звичайна модель

Послідовність слів мови $w_1 \dots w_n$ називається n -грамою довжини n , позначимо її w_1^n . Тоді імовірність w_1^n можна оцінити за формулою:

$$p(w_1^n) = p(w_1 | w_1^{i-1}) p(w_{i-1} | w_1^{i-2}) \dots p(w_1) \quad (1)$$

Умовні імовірності визначаються як

$$\hat{p}(w_i | w_{i-n+1}^{i-1}) = \frac{C(w_{i-n+1}^i)}{C(w_{i-n+1}^{i-1})} \quad (2)$$

де $C(w_{i-n+1}^i)$ - частота відповідної n -грами.

Така оцінка є оцінкою максимальної правдоподібності.

В українській мові суттєво більша кількість слів форм припадає на одну лему (канонічну форму)[2]. При однаковому наповненні моделі змістовними зв'язками це призводить до необхідності збільшувати словник слів форм.

Оскільки марковський ланцюг, а відповідно і n -грами будуються на слів формах, значна кількість n -грам набуває малих значень частот. Тому оцінка імовірностей по формулі (2) стає значно менш точною і сильніше залежить від корпусу на якому збиралися дані для моделі.

Ще одним загальним недоліком оцінки (2) є те, що в реальних корпусах не представлені всі можливі n -грами. Виникає потреба в застосуванні методу для згладжування частот та імовірностей відповідних n -грам. Раніше було запропоновано комбінувати відомі загальні методи згладжування з спеціалізованими[1].

Згладжена модель

Досліджується модифікована модель заснована на класах. Для розбиття на класи вводиться функція розбиття, що ставить у відповідність кожному слову w_i з словника системи V (тобто кожній слів формі, а не лемі) клас c_i . При цьому виконується:

$$P(w_i | w_1^{i-1}) = P(w_i | c_i) P(c_i | c_1^{i-1}), \forall i, 1 \leq i \leq n \quad (3)$$

Зроблено припущення, що для слів, які мають однакову синтаксичну поведінку можна стверджувати, що у схожих контекстах вони повинні мати схожі імовірності зустрічання.

Нехай для слів „каша”, „каші”, „страва”, „стравою”, „смачна”, „смачної”, „гаряча”, „гарячою” в корпусі спостерігалися біграми „смачна каша”, „смачної каші”, „гаряча страва”, „гарячою стравою”. Тоді спираючись на те, що ці іменники та прикметники мають схожу граматичну поведінку, можна побудувати припущення про імовірності появи їх в формах,

що не спостерігалися в корпусі, наприклад, для біграми „гарячої страви”.

Модель будується таким чином. $L(w_1^k)$ – сукупність послідовностей лем для послідовності слів форм w_1^k . $G(w_1^k)$ – сукупність послідовностей граматичних класів для послідовності слів форм w_1^k . $El(w_1^k)$ – сукупність послідовностей слів форм, що після приведення до лем мають однаковий запис, тобто сукупність $w_{i_1}^{i_k}$, таких що, $L(w_{i_1}^{i_k}) = L(w_1^k), \forall i$.

Тоді оцінка частоти w_1^k (псевдо частота) визначається так:

$$C(w_1^k) = \frac{C(L(w_1^k)) C(G(w_1^k))}{\sum_{G_F \in G(El(w_1^k))} G_F} \quad (4)$$

Щоби обчислені наново псевдо частоти були коректними висувається вимога:

$$C(w_{i-n+2}^i) = \sum_{j=0}^{|V|} C(w_j w_{i-n+2}^i) \quad (5)$$

де $|V|$ – розмір словника, а деякі $C(w_j w_{i-n+2}^i)$ можуть бути рівні 0.

Для забезпечення коректності моделі висуваються вимоги про незмінність суми частот лем та сума частот граматичних класів після перерозподілу[3].

$$C(G(w_{i-n+2}^i)) = \sum_{j=0}^{|V|} C(G(w_j w_{i-n+2}^i)) \quad (6)$$

$$C(L(w_{i-n+2}^i)) = \sum_{j=0}^{|V|} C(L(w_j w_{i-n+2}^i)) \quad (7)$$

Чисельний експеримент

Експеримент показав, що попри покриття всіх існуючих в навчальній вибірці комбінацій лем та комбінацій граматичних класів, повне покриття всіх потенційно існуючих мовних явищ не відбувається. Тому виникає потреба у додатковій формулі згладжування, що дозволить обчислити оцінки псевдо частот для тих елементів, що мають значення частоти рівним 0 навіть після застосування (4). В якості основної тестової моделі згладжування було вибрано метод Віттена-Бела[4] в варіанті з поверненнями. Також використано метод згладжування Лідстона, для порівняння. Модель містить n -грами розмірності ≤ 3 .

Модель Віттена-Бела визначається так:

$$\hat{p}(w_i | w_{i-n+1} \dots w_{i-1}) = \begin{cases} d(w_{i-n+1} \dots w_i), C(w_{i-n+1} \dots w_i) > 0 \\ \alpha_{w_{i-n+1} \dots w_{i-1}} \hat{p}(w_i | w_{i-n+2} \dots w_{i-1}) \text{ інакше} \end{cases} \quad (8)$$

де $d(w_{i-n+1} \dots w_i)$ – згладжене значення, $C(w_{i-n+1}^i)$, $\alpha_{w_{i-n+1} \dots w_{i-1}}$ – коефіцієнт, що визначає імовірнісну масу, перерозподілену для побудови імовірностей моделі меншого порядку.

$$\alpha_{w_{i-n+1} \dots w_{i-1}} = \frac{\beta_{w_{i-n+1} \dots w_{i-1}}}{\sum_{\{w_i: C(w_{i-n+1}^i)=0\}} \hat{p}(w_i | w_{i-n+2}^{i-1})} \quad (9)$$

$$\beta_{w_{i-n+1} \dots w_{i-1}} = 1 - \sum_{\{w_i: C(w_{i-n+1}^i)>0\}} d(w_{i-n+1}^i) \quad (10)$$

Для методу Віттена-Бела параметр d оцінюється так:

$$d_{WB}(w_i | w_{i-n+1}^{i-1}) = \frac{C(w_{i-n+1}^i)}{C(w_{i-n+1}^i) + T(w_{i-n+1}^i)} \quad (11)$$

де $T(w_{i-n+1}^i)$ – кількість типів n -грам, що передують слову w_i . При цьому, за замовчуванням, n -грами найвищого порядку з частотою 1 видаляються з моделі після побудови всіх таблиць.

Для згладжування Лідстона:

$$\hat{p}(w_i | w_{i-n+1}^{i-1}) = \frac{C(w_{i-n+1}^i) + \delta}{C(w_{i-n+1}^{i-1}) + \delta |V|} \quad (12)$$

де δ – параметр, що підбирається для отримання оптимальної оцінки.

Для оцінювання якості моделі застосовується оцінка на основі кросентропії:

$$H(p, m) = \lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \log m(w_1 w_2 \dots w_n) \quad (13)$$

де $m(w_1 w_2 \dots w_n)$ – модель для імовірності $p(w_1 w_2 \dots w_n)$. При цьому відомо, що

$$H(p) \leq H(p, m) \quad (14)$$

Для чисельного експерименту було сформовано корпус обсягом 112,5 МБ з стенограм Верховної Ради України. Відповідні стенограми було зібрано з сайту <http://rada.gov.ua/meeting/stenogr>. На корпусі було виділено словник системи з 10.000 словоформ різними методами. Словник на якому більшість методів показали хорошу оцінку був вибраний в якості основного. Було побудовано дві допоміжні n -грамні моделі на основі граматичних класів та на основі лем.

Ентропію було обчислено для таких варіантів реалізації згладжування:

- 1) без перерозподілу, метод Віттена-Бела,
- 2) без перерозподілу, метод Лідстона,
- 3) з перерозподілом, з фільтрацією а потім методом Віттена-Бела,
- 4) з перерозподілом, фільтрацією а потім методом Лідстона,
- 5) з перерозподілом, без фільтрації, із врахуванням повної інформації, та методом Віттена-Бела.

В перших 4 варіантах всі непотрібні слова одразу замінювалися на стоп-слово „#”. Фільтрація передбачає викидання з триграм згладженої моделі тих, що мають відповідні низькі частоти в допоміжних моделях. Для урахування повної інформації спочатку виконується перерозподіл, а лише після того непотрібні слова замінюються на стоп-слово „#”. Це суттєво зменшує кількість триграм, якими поповнюється модель. Всі варіанти обчислювались з крос-валідацією.

Таким чином, ця серія експериментів, разом з раніше проведеними[5] повністю покриває всі змістовні методи формування моделей.

Результати експерименту наведені в таблиці

1. Як видно з наведених чисел, використання

Таблиця 1

Результат експерименту

Метод	Ентропія(середня)
1	6,92
2	7,11
3	6,91
4	7,17
5	7,63

методу 3 (ключового в усьому дослідженні) принаймні не погіршує оцінки.

Висновки

Показано, що метод згладжування на основі граматичної інформації дозволяє ефективно згладжувати n -грамну модель мови, і принаймні не погіршує оцінку. Чисельні експерименти показали, що про безпосереднє застосування формули (4) не гарантує хорошого результату навіть з фільтрацією та використанням більш строгих класів. Відповідно, необхідно виконувати підбір елементів словника, що крім іншого помітно впливає на абсолютне значення ентропії. При цьому крім прямої перевірки значення ентропії немає способу гарантувати підвищення якості.

Як показав аналіз, методи на основі евристики Гуда[6], або Кнесера-Нея[7] не дуже підходять, бо або не мають форми для псевдочастот, або вимагають підгонки

параметрів. При підгонці параметрів, як це було показано на прикладі метода Лідстона, перерозподілена модель втрачає свої переваги.

Також, добре видно, що спроба врахувати повну інформацію з корпусу призводить до погіршення якості моделі. Схоже, це пов'язано з тим, що n-грами з стоп-словом „#” можна

сприймати як скіп-грами – n-грами з пропущеними словами, які теж корисні, коли мають високі частоти. А от намагання врахувати всі словоформи призводить до накопичення низькочастотних елементів (шумів).

Список використаних джерел

1. Тарануха В.Ю. Застосування класів основаних на канонічних формах слів та на граматичних класах в задачі редукції n-грамної моделі мови для розпізнавання української мови. /Тарануха В.Ю. // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка Серія: фізико-математичні науки. –2013, – Спецвипуск. – С. 176-179.
2. Бабин Д.Н. О перспективах создания системы автоматического распознавания слитной устной русской речи. /Бабин Д.Н, Мазуренко И.Л. , Холоденко А.Б.// Интеллектуальные системы. –2004. – Т.8, –Вып. 1-4,– С.45-70.
3. Тарануха В.Ю. Модифікація n-грамної моделі, заснованої на класах, для розпізнавання слов'янських мов / Тарануха В.Ю.// Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка Серія: фізико-математичні науки. – 2014. – Вип 1. – С. 193-196
4. I. H. Witten The Zero-Frequency Problem: Estimating the Probabilities of Novel Events in Adaptive Text Compression/ I. H. Witten and T. C. Bell // IEEE Transactions on Information Theory, – 1991. Vol. 37(4), –P. 1085–1094.
5. Тарануха В.Ю. Згладжена n-грамна модель, заснована на класах, для розпізнавання слов'янських мов / Тарануха В.Ю. // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка Серія: фізико-математичні науки. –2014. – Вип 2. – С. 202-205.
6. I.J. Good, The population frequencies of species and the estimation of population parameters //Biometrika, –1953. Vol. 40 (3–4),–P. 237–264.
7. R. Kneser Improved backing-off for m-gram language modeling / R. Kneser and H. Ney// Proceedings of the IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing, –1995. Vol. 1, –P. 181–184.

References

1. TARANUKHA, V. (2013) Applying classes based on canonical forms of words and the grammar classes in the problem of reduction of n-gram language model for recognition of the Ukrainian language, *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Physics & Mathematics*, (Special issue), pp. 176-179.
2. BABIN, D., MAZURENKO, I., HOLODENKO, A. (2004) О перспективах создания системы автоматического распознавания слитной устной русской речи, *Intelligent systems*, 8(1-4), pp. 45-70.
3. TARANUKHA, V. (2014) Modification of class-based n-gram model for slavic speech recognition, *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Physics & Mathematics*, (1), pp. 193-196.
4. WITTEN, I. and BELL, T. (1991) The Zero-Frequency Problem: Estimating the Probabilities of Novel Events in Adaptive Text Compression, *IEEE Transactions on Information Theory*, 37(4), pp. 1085-1094.
5. TARANUKHA, V. (2014) Smoothed class-based n-gram model for recognition of Slavic languages, *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Physics & Mathematics*, (2), pp. 202-205.
6. GOOD, I. (1953) The population frequencies of species and the estimation of population parameters, *Biometrika*, 40(3–4), pp. 237–264.
7. KNESER, R. and NEY, H. (1995) Improved backing-off for m-gram language modeling, *Proceedings of the IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing*, 1, pp. 181–184.

Надійшла до редколегії 2.07.15

УДК 519.68

Терещенко В.М., д. ф.-м.н., проф.
Корюкалов О.В., аспірант

V.M. Tereshchenko, Dr. Sci. (Ph.-M.), Professor
O.V. Koriukalov, PhD student

Пошук найкоротшого шляху на множині геометричних об'єктів

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4д,
e-mail: v_ter@ukr.net
e-mail: karia@bigmir.net

Searching shortest paths on a set of geometric objects

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: v_ter@ukr.net
e-mail: karia@bigmir.net

Робота присвячена дослідженню задачі пошуку найкоротшого шляху між двома заданими точками на множині геометричних об'єктів. В статті представлено огляд та аналіз основних алгоритмів.

Ключові слова: триангуляція, найкоротший шлях, багатокутна область.

The paper is devoted to research the problem of finding shortest path between two given points on given geometrical objects set. The article provides an overview and analysis of key algorithms. Computing a shortest path in a geometric domain have many applications in robotics, geographic information systems, wire routing, etc. The most basic form of the problem is: given a collection of obstacles, find a Euclidean shortest obstacle-avoiding path between two given points. A much broader collection of problems is defined by several parameters, that define the problem: objective function, constraints on the path, input geometry, dimension of the problem, type of moving object, single shot vs. repetitive mode queries, static vs. dynamic environment, exact vs. approximate algorithms, known vs. unknown map. In most cases open problems from this scope are improving performance, or reducing memory of existing algorithms. For some tasks (for example traveling salesman problem, computing the optimal path with obstacles in three-dimensional space), it is proved that they are NP-complex, and it is impossible to improve existing algorithms. Moreover, for other classes of problems, such as searching shortest path on polyhedral surface, we can improve the time complexity of algorithm by using a better data structures.

Key Words: triangulation, optimal path, polyhedral surface, polygonal domain.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

1. Вступ

Постановка проблеми. Обчислення оптимального шляху на множині геометричних об'єктів — фундаментальна задача обчислювальної геометрії, що має широке застосування. Задача полягає у пошуці найкоротшого шляху між двома заданими точками, що оминає задані перешкоди. Така проблема часто виникає в робототехніці, плануванні руху, навігації, тощо.

Актуальність. В наш час алгоритми знаходження оптимальних шляхів за евклідовою

Метою даної статті є класифікація задач пошуку найкоротших шляхів, огляд базових

мірою використовуються майже в усіх комп'ютерних іграх, геоінформаційних системах (GIS), при прокладанні дротів, автомобільних навігаторах та ін. Зв'язна міра використовується у робототехніці, коли зміна напрямку руху є набагато дорожчою за сам рух. Зв'язна міра без використання точок Штейнера використовується у задачах передавання прямолінійних бездротових сигналів, де необхідно мати можливість швидко визначати, як передати сигнал з однієї точки території до іншої з використанням найменшої кількості передавачів. алгоритмів, аналіз переваг та недоліків існуючих підходів.

2. Класифікація задач пошуку оптимального шляху

Сформулюємо загальну постановку задачі пошуку оптимального шляху на множині перешкод.

Загальна постановка задачі. Дано множину k перешкод у евклідовому просторі (у вигляді геометричних фігур) між двома точками. Необхідно знайти найкоротший за евклідовою мірою шлях між двома точками, що оминає перешкоди.

Систематизація задачі пошуку найкоротшого шляху є результатом декількох факторів, що визначають задачу: цільова функція, додаткові обмеження до шляху, геометрія вхідних даних, розмірність, статика-динаміка, неповна інформація про геометрію перешкод, точність алгоритмічної реалізації, тощо.

Далі коротко оглянемо існуючі класи задач, наведемо часові оцінки найкращих алгоритмів їх розв'язання, сформулюємо відкриті проблеми.

2.1. Цільова функція

У багатьох випадках при вирішенні сформульованої вище задачі можуть постати наступні питання:

- яким чином ми вимірюємо довжину шляху?
- в якій метриці розглядається задача (евклідова метрика, L_1 метрика, L_p метрика, зв'язна міра і тд.)?

Зважаючи на це можна розглянути відповідні класи задач пошуку оптимального шляху на множині перешкод (ЗПОШМП) та відповідні алгоритми їх розв'язання.

Алгоритм пошуку оптимального шляху в багатокутній області за евклідовою метрикою $O(n \log n)$, $O(n + h^2 \log n)$. Прикладом алгоритму пошуку оптимального шляху в багатокутній області за евклідовою метрикою може бути наступний: спочатку побудуємо граф видимості [1] за час $O(E + n \log n)$, потім, використовуючи алгоритм Дейкстри, будемо дерево найкоротших шляхів за $O(E + n \log n)$ [3]. Більш детально алгоритм описано в розділі 3.1.1.

Алгоритм пошуку оптимального шляху в багатокутній області за зв'язною мірою. В задачі пошуку мінімально-з'єднувального шляху, нашою метою є мінімізація кількості з'єднань (та відповідно кількості поворотів) в шляху, що сполучає s і t . У багатьох задачах, з'єднувальна відстань забезпечує більшу точність у вимірі складності шляху, ніж Евклідова довжина, так само як і при використанні програмного

забезпечення для спрощення кривої. У роботі [2], було запропоновано алгоритм, що знаходить оптимальний за зв'язною мірою шлях за час $O(E_{VG} \alpha^2(n) \log n)$, використовуючи області видимості.

Алгоритм пошуку оптимального шляху в багатокутній області за L_1 метрикою. Замість вимірювання довжини шляху відповідно за допомогою міри L_2 (Евклідової), розглядають задачу обчислення найкоротших шляхів в багатокутній області P , що є простішою для розв'язання за допомогою міри L_1 [4]. Алгоритм пошуку оптимального шляху наступний: використовуючи неперервний метод Дейкстри, отримаємо граф найкоротших шляхів за $O(n \log n)$ часу, $O(n)$ пам'яті.

2.2. Додаткові обмеження до шляху

Інколи накладаються певні умови на характер шляху: пошук простого шляху від точки s до t , або пошук шляху з обов'язковим відвідуванням набору точок або областей і т.п.

Побудова мінімального зв'язувального дерева. Мінімальне кістякове дерево зв'язаного неорієнтованого графа — ациклічний зв'язний підграф цього графа, який містить всі його вершини, із найменшою можливою сумою ваг його ребер. Неформально кажучи, кістякове дерево складається з деякої підмножини ребер графа, таких, що рухаючись цими ребрами можна з будь-якої вершини графа потрапити до будь-якої іншої. Враховуючи той факт, що мінімальне зв'язувальне дерево є підграфом діаграми Делоне, в статті [5] наведено алгоритм, що обчислює його за час $O(n \log n)$.

Дерево Штейнера. Дерево, яке має найкоротшу довжину на множині S з n точок і задовольняє умові, що до множини S не заборонено додавати нові точки, називається деревом Штейнера. У статті [6] показано, що задача пошуку дерева Штейнера є NP-повною.

Задача комівояжера (TSP). Задача комівояжера полягає у знаходженні найвигіднішого маршруту, що проходить через вказані міста хоча б по одному разу. В умовах завдання вказуються критерій вигідності маршруту (найкоротший, найдешевший, сукупний критерій тощо) і відповідні матриці відстаней, вартості тощо. Зазвичай задано, що маршрут повинен проходити через кожне місто тільки один раз, в такому випадку розв'язок знаходиться серед гамільтонових циклів. Задача комівояжера для точок, що належать Евклідовій площині є NP-складною, що показано у статті [7].

2.3. Геометрія вхідних даних

Постановка задач ОШМП розрізняється також геометрією вхідних даних. Так, зокрема, геометричними фігурами множини вхідних даних можуть бути такі многокутники: опуклі, зіркові, прості, а також спеціальні многокутники (ізотетичні, з дірками) та фігури (кола, еліпси тощо).

Пошук оптимального шляху у простому многокутнику $O(n)$. Основна задача геометричного пошуку найкоротшого шляху — знайти найкоротший шлях усередині *простого* багатокутника P , сполучаючи дві точки, s і t . Доповнення P служить перешкодою, яку шлях не може перетинати. Алгоритм пошуку оптимального шляху було запропоновано в статті [8]. Спочатку будується триангуляція простого багатокутника, дуальний граф якої буде деревом. Об'єднуючи трикутники вздовж рукавів, пошук найкоротшого шляху у дереві будується за $O(n)$. Більш детально алгоритм розглянуто в розділі 3.2. Пошук оптимального шляху у багатокутній області представлено розділі 3.1.1.

Тривимірний випадок задачі пошуку оптимального шляху на многогранній поверхні подано в розділі 4.2. Залишається відкритим питання: чи можна обчислити найкоротший шлях на опуклому політопі за квадратичний час?

2.4. Тип рухомого об'єкту (автомату)

Поки що, ми розглянули лише задачу оптимально рухомого точкового автомату. Якщо автомат моделюється як круг, або як багатокутник, що не обертається, тоді більшість результатів просто переноситься із класичної задачі, застосовуючи стандартний підхід *конфігураційного простору* в плануванні руху: «скорочення» автомату до (необхідної) точки, і «зростання» перешкод (використовуючи суму Мінковського), таким чином, що доповнення збільшених перешкод моделює область площини. Оптимальний рух не круглих автоматів *що обертаються* — набагато складніша задача. Навіть найпростіший випадок руху (одиниці) лінійного сегменту в площині, надзвичайно нетривіальний.

2.5. Розмірність простору задачі

В залежності від розмірності простору в якому розглядається задача можна виділити такі задачі:

- задача пошуку оптимального шляху у багатокутній області на площині ($O(n \log n)$,

$O(n+h^2 \log n)$); детальна інформація міститься у розділі 3.1;

- задача пошуку оптимального шляху з перешкодами в тривимірному просторі $O(2^n)$.

У статті [11] було запропоновано алгоритм пошуку оптимального шляху в тривимірному просторі з перешкодами зі складністю $O(2^{2^n})$, що базується на зведенні оригінальної задачі до проблеми прийняття рішень на закритому полі дійсних чисел, який було оптимізовано до $O(2^n)$ у статті [10]. Детально алгоритм розглянуто в розділі 4.1.1.

Для цього випадку відкритими залишаються такі проблеми:

1. Чи може Евклідова задача пошуку найкоротшого шляху бути вирішена за час в $O(n+h \log n)$ області $O(n)$?
2. Використовуючи яку структуру даних можна ефективно обробити точний двоточковий запит в багатокутній області?
3. Як ефективно можна обчислити геодезичний центр/діаметр для багатокутної області?
4. Як ефективно можна розв'язати задачі Евкліда (пошуку найкоротших шляхів, геодезичного центру/діаметру) в моделі розрядної складності (замість реальної оперативної пам'яті) обчислення?

2.6. Точність алгоритмічної реалізації

В більшості випадків бажаний точний розв'язок задачі, проте не завжди просто його отримати. Наприклад, деякі задачі пошуку оптимального шляху зводяться до NP-повних, для яких існують наближені поліноміальні алгоритми їх розв'язання. Так у праці [12] запропоновано наближений поліноміальний алгоритм для цілого класу задач і в тому числі задачі побудови дерева Штейнера за час $O(n^{O(1/e)})$. Цей метод базується на оптимізації динамічним програмуванням певного класу мереж. Також він може бути використаний для задачі комівояжера.

Пошук оптимального шляху в тривимірному просторі з перешкодами. У роботі [13] було запропоновано наближений алгоритм який працює за час $O(n^2 \log n/e^4)$, що для знаходження оптимального шляху буде конусний граф видимості.

Пошук оптимального шляху на многогранній поверхні. У роботі [14] було запропоновано наближений алгоритм пошуку оптимального шляху на багатогранній поверхні за $O(n^{5/3} \log^{5/3} n)$, що базується на розбитті поверхні на $O(n/r)$ патчів, кожен з яких містить максимум r граней. Потім на границі кожного з

патчів обирається множина точок (порталів), що поєднуються у граф, до якого застосовуємо алгоритм Дейкстри.

2.7. Повнота інформації про геометрію перешкод

На практиці може постати задача, в якій не повна інформація щодо розміщення перешкод, наприклад, якщо в якості автомату виступає тактильний робот, що дізнається про структуру перешкод тільки коли дотикається до них, або робот, що дізнається про структуру перешкод коли вони потрапляють в зону його видимості.

Сконцентруємося на точних алгоритмах пошуку оптимального шляху для двовимірного та тривимірного випадків, а також на випадках із спрощеною геометрією вхідних даних.

3. Алгоритми пошуку оптимального шляху в двовимірному просторі

Розглянемо існуючі оптимальні алгоритми та їх модифікації.

3.1. Пошук оптимального шляху з перешкодами в багатокутній області

Алгоритм пошуку оптимального шляху в багатокутній області $O(n+h^2 \log n)$ [19]. У статті [19] пропонується алгоритм, що обчислює найкоротший за евклідовою метрикою шлях в багатокутній області за час $O(n+h^2 \log n)$, використовуючи $O(n)$ пам'яті. Основна ідея алгоритму полягає у зведенні задачі до більш простої - пошуку оптимального шляху з перешкодами у вигляді опуклих багатокутників, що вирішується за час $O(n+h^2 \log n)$.

Спочатку триангулюємо багатокутну область за час $O(n+h \log h)$. Додамо s і t (початкова та кінцева точки шляху) до триангуляції, зв'язавши s (аналогічно t) з кутами трикутника якому вона належить. Позначимо через T отриману триангуляцію, двоїстий до T граф позначимо G_t . G_t є планарним графом з $O(n)$ вершинами, $O(n)$ ребрами і $h+1$ гранями.

Зменшимо граф G_t розділивши його на "коридори" наступним чином: спочатку вилучимо вершини з яких виходить лише одне ребро, потім вилучимо вершини яким інцидентні два ребра, замінивши відповідні два ребра на одне. Зрештою отримаємо граф (позначимо його G), що має тільки три-інцидентні вершини, а саме $2h-2$ вершин, $h+1$ граней, $3h-3$ ребер (за формулою Ейлера). Кожній вершині G відповідає трикутник з T , назовемо такий трикутник вузловим. Границя коридору (рис. 1 [19])

складається з чотирьох частин: полігональний ланцюг вздовж перешкоди O_1 з a до b ; діагональне ребро bc вузлового трикутника; полігональний ланцюг вздовж перешкоди O_2 з c до d ; діагональне ребро da вузлового трикутника; Сегменти ad і bc є дверями коридору. Якщо знайти найкоротші шляхи з a до b і з c до d , отримаємо регіон в формі пісочного годинника H . На рис. 1 ліворуч цей регіон відкритий, праворуч - закритий. Позначимо через $Q < P$ регіон що містить усі вузлові трикутники, та "пісочні годинники". Очевидно, що для будь-яких s і t , оптимальний шлях буде належати Q .

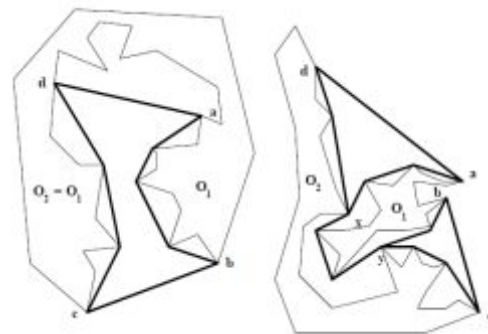


Рис. 1. Представлення коридору у вигляді двох полігональних ланцюгів та двох діагональних ребер.

Легко помітити, що границя Q (за виключенням ланцюгів закритих "пісочних годинників"), може бути представлена у вигляді $O(h)$ опуклих полігонів. Отже графі видимості Q буде містити $O(h^2)$ ребер.

Обчислимо складність алгоритму. Шляхи в усіх "коридорах" обчислюються за час $O(n)$. Використовуючи імплементацію алгоритму Дейкстри зі статті [1], пошук в графі видимості може бути здійснено за час $O(h^2 \log h)$. Крім того, на триангуляцію було витрачено $O(n + h \log h)$. Отже, сумарна часова оцінка складає $O(n + h^2 \log n)$.

Алгоритм пошуку оптимального шляху в багатокутній області [23] ($O(n \log n)$, $O(n)$). В роботі [23] пропонується алгоритм пошуку оптимального шляху в багатокутній області з використанням $O(n \log n)$ часу та $O(n)$ пам'яті. Основна ідея алгоритму полягає в розбитті основної задачі на п'ять підзадач: регуляризація графа, виділення монотонних багатокутників, триангуляція монотонних багатокутників, локалізація точок, алгоритм A^* . Коротко

опишемо та обґрунтуємо складність кожної підзадачі.

Регулярність графа розглядається відносно деякої прямої l , нехай це буде OX . Зорієнтуємо граф за зростанням y напрямку осі OX . Тоді вершину v будемо називати регулярною, якщо множини вхідних і вихідних з цієї вершини ребер одночасно не порожні. Граф називається регулярним відносно прямої (наприклад, осі OY або OX), якщо усі його вершини, окрім першої та останньої, регулярні. Для регуляризації графа використовується алгоритм плоского замітання [15] ($O(n \log n)$ - часу, $O(n)$ - пам'яті).

Для виділення монотонних багатокутників будемо використовувати метод ланцюгів [16], що потребує $O(n \log n)$ часу.

Алгоритм триангуляції монотонних багатокутників використовує стек вершин, що розглядаються, та потребує $O(n)$ часу.

Локалізацію точки в n -вершинному планарному підрозбитті можна реалізовувати методом ланцюгів [16] за час $O(\log^2 n)$ з використанням $O(n)$ пам'яті, витрачаючи $O(n \log n)$ часу на передобробку.

Алгоритм A^* [17] покроково розглядає усі шляхи, що ведуть з початкової вершини до кінцевої, доки не знайде мінімальний, і також в найгіршому випадку потребує $O(n \log n)$ часу.

Отже, загальна складність алгоритму буде дорівнювати сумі складностей його кроків, тобто $O(n \log n)$.

3.2. Пошук оптимального шляху у простому багатокутнику

Розглянемо існуючі оптимальні алгоритми та їх модифікації.

Алгоритм пошуку оптимального шляху з використанням триангуляції [20-21] за $O(n)$. Беручи за основу статті В. Chazelle [20-21] задача пошуку найкоротшого шляху в простому багатокутнику може бути вирішена за час $O(n)$. Спочатку побудуємо триангуляцію багатокутника [20] за $O(n)$. Основна ідея запропонованого алгоритму полягає у створенні грубої триангуляції на етапі знизу-вверх, і обчисленні результуючої триангуляції на етапі зверху-вниз, з використанням раніше обчисленої інформації по шляху. Основними методами, що використовуються є теорема про розріз полігона, яка дає нам схеми балансування, і теорема про лінійні сепаратори, що застосовується для побудови нових діагоналей. Побудувавши триангуляцію, розглянемо двоїстий до неї граф.

Послідовність трикутників триангуляції що відповідають шляху з s до t назовемо "рукавом". У статті [21] наведений алгоритм пошуку найкоротшого шляху в рукаві за час $O(n)$, використовуючи послідовне додавання трикутників триангуляції вздовж рукава.



Рис. 2. Представлення рукава у вигляді воронки та двох полігональних ланцюгів.

"Рукав" складається з так званої "воронки" (з основою ab , та коренем r), та двох (увігнутих) найкоротших шляхів, що з'єднують r з a і b відповідно, рис. 2 [18]. Додаючи до розгляду вершину c , ми розділяємо воронку на дві частини вздовж найкоротшого шляху з r до c , що буде містити відрізок uc , де u належить одному з увігнутих ланцюгів воронки. Після розділення зберігається властивість що новоутворена воронка (з основою ac або bc) також містить найкоротший шлях. Пошук точки u може бути здійснено за час $O(1)$, підтримуючи чергу вершин воронки. Триангуляцію простого багатокутника було виконано за час $O(n)$, пошук найкоротшого шляху з використанням "рукавів" також складає $O(n)$, отже, загальна часова оцінка складності алгоритму буде також $O(n)$, оскільки кожен з його кроків в найгіршому випадку потребує $O(n)$ часу.

Алгоритм пошуку оптимального шляху в простому багатокутнику з передобробкою за $O(n)$, та часом запиту $O(\log n)$ [22]. У статті [22] запропоновано алгоритм, що на етапі передобробки будує структуру даних за час $O(n)$, використовуючи яку, пошук найкоротшого шляху між двома точками може бути здійснено за $O(\log n)$. Ідея, що лежить в основі методу не складна. Фаза попередньої обробки створює над основною триангуляцією ієрархію вкладених субполігонів, таку, що будь-який найкоротший шлях перетинає тільки невелику кількість допоміжних субполігонів. Ми зберігаємо інформацію про найкоротші шляхи всередині кожного такого субполігону. Під час запиту, ми знаходимо найкоротший шлях між точками

запиту, агрегуючи інформацію обчислену для субполігонів.

Побудуємо двійкове дерево S декомпозиції вихідного полігона P . Коренем дерева буде власне діагональ d , що ділить P на два приблизно рівних субполігони P_1 і P_2 , тоді діагоналі P_1 і P_2 будуть дітьми d , і т.д. рекурсивно для кожного P_i , поки P_i не буде трикутником. Найкоротші шляхи, що проходять через субполігон P_i перетинають дві діагоналі, які є границями P_i . Знайдемо фактор граф S^* , додаючи до S ребра, що з'єднують d з батьківською вершиною, та усі діагоналі-границі P_d . Кожне ребро S^* відображає пару діагоналей, для яких ми зберігаємо інформацію про найкоротший шлях, що їх перетинає. Отриманий фактор граф буде мати лінійну кількість вершин. Отже найкоротший шлях для будь-яких точок s і t , буде перетинати $O(\log n)$ діагоналей.

Алгоритм запиту (пошуку найкоротшого шляху між точками s і t) складається з чотирьох кроків: локалізація точок на триангуляції; знаходження підпоследовностей розділяючих діагоналей D_s і D_q ; пошук "пісочного годинника" між dp і dq ; об'єднання $H(p, dp)$, $H(dq, q)$ з $H(dp, dq)$. Кожен з цих кроків має логарифмічну часову оцінку складності, отже загальна часова оцінка запиту складає $O(\log n)$.

Алгоритм пошуку мінімального зв'язаного шляху у простому многокутнику ($O(n \cdot r^2)$ передобробка, $O(\log r)$ запит) [25]. У статті [25], представлено алгоритм, що на етапі передобробки будує структуру даних за час $O(n \cdot r^2)$, використовуючи яку, пошук мінімального зв'язаного шляху між двома точками може бути здійснено за $O(\log r)$. Основна ідея алгоритму полягає в розбитті полігона на області видимості, в яких потім здійснюється локалізація точки.

Алгоритм попередньої обробки.

1. Спочатку будуємо граф видимості ($O(E)$).
2. Далі будуємо опуклу оболонку многокутника за алгоритмом D.T. Lee [26]. Опукла оболонка буде коренем дерева областей ($O(N)$).
3. Знайдемо список вікон, які утворюють усі вершини многокутника ($O(N^2)$) та додамо до цього списку початкові сторони многокутника. Усі відрізки списку будемо зберігати таким чином, щоб з лівого боку від відрізка була видима частина, а з правого боку – невидима. Нехай S – це кількість таких відрізків.

4. Далі у випадковому порядку додаємо вершини до дерева областей наступним чином: вносимо відрізок у вершину дерева областей; якщо вершина є листком, то розрізаємо відрізок на 2 області та записуємо частини що утворилися у відповідні нащадки цієї вершини, а відрізок – як відтинаючу пряму цієї вершини; інакше, перевіряємо позицію відрізка відносно відтинаючої прямої у вершині; якщо він не перетинає її – продовжуємо пошук у тому під-дереві, у яке потрапив відрізок; якщо перетинає – розділяємо відрізок на 2 частини та вставляємо ці частини у відповідні під-деревя; усі відрізки, що накладаються вилучаємо.

Нехай R – загальна кількість утворених областей. Для кожної з утворених областей видимості знаходимо центр та видимі точки з цього центру ($O(N)$). На основі цього будуємо дерево найкоротших шляхів пошуком у ширину ($O(E)$).

Алгоритм виконання запиту.

1. Перевіряємо точки на видимість, якщо прямої видимості немає – починаємо пошук.
2. Локалізуємо точки у дереві ($O(\log r)$). Для цього ми у вершині дерева перевіряємо, з якого боку від відтинаючої прямої знаходиться точка і продовжуємо пошук у відповідному під-дереві, поки не дійдемо до листка. Якщо точка знаходиться на відтинаючій прямій то за нашою побудовою ліва частина для відрізка, який утворив відтинаючу пряму, буде видимою, отже пошук продовжувати будемо в лівому під-дереві.
3. Локалізавши точки, знаходимо ту видиму вершину з точок видимості іншої області, до якої найкоротший шлях від першої області ($O(W)$). Відповідно ця довжина +2 буде мінімальною зв'язною довжиною, а сам шлях можна вивести за W , де W – його довжина ($O(W)$).

Обґрунтування складності. Для досягнення часу запиту $O(\log N)$ під час попередньої обробки знайдемо карту мінімальних шляхів між усіма областями видимості ($O(N \cdot R^2)$ час, $O(R^2)$ пам'ять). Тоді під час пошуку необхідно буде лише локалізувати точки – $O(\log R)$.

4. Алгоритми пошуку оптимального шляху в тривимірному просторі

4.1. Пошук оптимального шляху з перешкодами в тривимірному просторі

Алгоритм [10] ($O(2^n)$ часу). У статті [10] пропонується алгоритм, що обчислює найкоротший за евклідовою метрикою шлях в тривимірному просторі з перешкодами за час

$O(2^n)$. Попередні найкращі результати мали часову оцінку складності $O(2^{2^n})$ і були запропоновані в статті [11]. Основна ідея алгоритму полягає у представленні вихідної задачі у вигляді виразу в теорії дійсно-замкнених полів. Нехай n - загальна кількість ребер перешкод; k - кількість "островів" (острів - опукла підмножина простору перешкод); $E = \{e_1, \dots, e_n\}$ - множина ребер; якщо ребро $e = (u, v)$ має довжину l , тоді для $0 \leq d \leq 1$, $e(d)$ - точка на uv , що знаходиться на відстані dl від u , $e(0) = u$, $e(1) = v$; $s = e_1(0)$ - точка початок шляху, $t = e_n(1)$ - точка кінець шляху. Не порушуючи загальності можемо вважати що s і t кожна належить одному з "островів".

Відкрита формула $F(x_1 \dots x_m)$ в теорії дійсно-замкнених полів складається з логічних операцій кон'юнкції, диз'юнкції, заперечення та нерівності на множині раціональних поліномів від змінних $x_1 \dots x_m$. Формула з кванторами в цій теорії має вигляд $Q_1 x_1 \dots Q_r x_r F(x_1 \dots x_m)$, де Q_i - квантори, її ступінь - максимальна ступінь полінома в формулі F . Запропонований підхід полягає в тому, що для заданого l ми можемо описати формулою такого вигляду найкоротший шлях між s і t . Як показано у статті [3] дана формула в теорії дійсно-замкнених полів для довжини l , ступеню d , та кількості змінних v може бути перевірена на виконуваність за $dl^{O(v)}$. Ключовим моментом статті [10] є теорема, в якій показано що $v = O(\log k)$. Отже отримаємо одно-експотенційну загальну оцінку складності $n^{O(k)}$ роботи алгоритму.

4.2. Побудова оптимального шляху на многогранній поверхні

Алгоритм пошуку оптимального шляху на многогранній поверхні за $O(n^2)$ [9]. У статті [9] було запропоновано алгоритм, що знаходить найкоротший шлях на необов'язково випуклій багатогранній поверхні за час $O(n^2)$. На відміну від використовуваних раніше підходів (J. S. B. Mitchell, D.M. Mount, C. H. Papadimitriou, $O(n^2 \log n)$ [27]), цей підхід відрізняється від неперервного алгоритму Дейкстри. Ключовим спостереженням є "один кут - одне розбиття", що задає верхню оцінку кількості гілок в дереві послідовностей. У статті спочатку розглядають випадок опуклого многогранника, який потім узагальнюють. Триангулюємо усі грані багатокутника S , також додамо до триангуляції вершини початку і кінця шляху s і t . Послідовність граней F задається як список

суміжних граней таких що та містять спільне ребро. Будемо називати список послідовністю ребер. Використаємо метод, що називається площинна розгортка. Послідовність ребер буде розгорнута в такий спосіб: обертаємо навколо поки площини і не співпадуть і т.д. Будемо мати, що всі грані лежать в площині. Загальний вигляд найкоротшого локально шляху — шлях, який проходить через послідовність вершин та послідовність ребер, такий що розгортка шляху вздовж будь-якого ребра — це прямий відрізок і обидва кути шляху, що проходить через вершину більші або дорівнюють. Глобально найкоротший шлях геодезичний і має додаткову властивість: ніяке ребро не може з'явитися в більш ніж одній послідовності ребер і кожне ребро послідовності має бути простим.

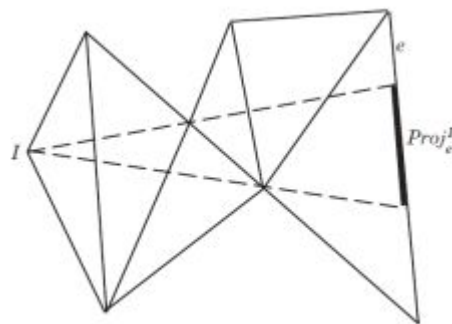


Рис. 3. Інтервальне вікно.

Тепер можемо побудувати дерево послідовностей, оскільки найкоротші шляхи з вершини s , можуть бути впорядковані за кутом під яким вони виходять з s . При побудові шляху на розгортці будемо використовувати проєкції ребер (інтервальні вікна) – рис. 3 [9]. Дерево послідовностей, що містить послідовність проєкцій ребер, буде експоненціального розміру, і матиме не більше n рівнів, де n — кількість граней. СН-агоритм уникає експоненційної складності, завдяки властивості "один кут — одне розбиття". Нижче наведений алгоритм побудови дерева послідовностей.

Алгоритм Чена [9].

1.Проводимо ініціалізацію: для всіх вершин, крім початкової, встановлюємо відстані в $+\infty$, потім асоціюємо кожний кут з нульовим інтервальним вікном та кожну вершину з нульовим псевдо-початковим вікном. Нарешті, вводимо FIFO чергу Q для зберігання подій.

2. Присвоюємо початковій вершині відстань 0, створюємо псевдо-початкове вікно w для s і кладемо w в Q .

3. ПОКИ Q не порожня і рівень не перевищує число граней n : беремо вікно w з Q ; якщо w — псевдо-початкове, $w=(d, v)$; якщо $d <$ поточна оцінка відстані в v ; оновлюємо значення відстані v ; якщо v — сідлова - видаляємо всі старі псевдо-початкові вікна в v та його піддеревах.

4. Для кожного ребра, протилежного v , додаємо дочірнє вікно $(d, v, e, [0, 1])$ у хвіст списку Q .

5. Оновлюємо відстань кожної вершини v' суміжної до v через w і додаємо псевдо-початкове вікно якщо в Q ІНАКШЕ // w — інтервальне, $w=(d, l, e, [a, b])$.

6. Якщо w має тільки одне дочірнє вікно на лівому (правому) ребрі або w не зайняло протилежний кут у w' , тоді: рахуємо лише дочірні і заносимо в Q ; ІНАКШЕ // w займає протилежний кут у w .

7. Видалити скасоване піддерево w' .

8. Порахувати два дочірні дерева w і занести в Q .

9. Перевірити чи w може давати найкоротшу відстань до v , протилежно ребру e ; якщо так, оновлюємо відстань у v ; і якщо v — сідлова або гранична, необхідно також згенерувати псевдо-початкове вікно в v і вставити в чергу Q .

Фактично ми побудували розріз многогранника, за найкоротшими шляхами до кожної з його вершин. J. Chen та Y. Han довели, що загальне число згенерованих вузлів (включаючи скасовані) рівне $O(n^2)$. Отже загальна часова оцінка складності $O(n^2)$.

У статті [24] пропонується два способи покращення алгоритму Чена для пошуку

Список використаних джерел

1. Riviere S. Topologically sweeping the visibility complex of polygonal scenes / S. Riviere. - In Proc. 11th Annu. ACM Sympos. Comput. Geom. - 1995. - P. 36-37.
2. Maheshwari A. Link distance problems / A. Maheshwari, J.-R. Sack, J. Urrutia. - Handbook of Computational Geometry // Elsevier Science Publishers B.V. North-Holland, Amsterdam. - 1998. - P. 112-116.
3. Fredman M. Fibonacci heaps and their uses in improved network optimization problems / M. Fredman, R. E. Tarjan. - J. ACM — 1987. - P. 596-615.
4. Mitchell J. S. B. L1 shortest paths among polygonal obstacles in the plane / J. S. B. Mitchell. - Algorithmica. - 1992. - P. 55-88.

мінімального шляху на многогранній поверхні. Основна ідея полягає в тому, щоб відсіяти непродуктивні вікна, які значно погіршують час роботи алгоритму в загальному випадку і витрачають багато пам'яті. Інша ідея полягає в належній підтримці черги з пріоритетами, так як і в алгоритмі Дейкстри.

5. Висновки

В даній роботі представлено огляд існуючих задач пошуку оптимального шляху, та проведено аналіз базових алгоритмів їх розв'язання. Систематизація задачі пошуку найкоротшого шляху є результатом декількох факторів, що визначають задачу: міра довжини шляху, геометрія множини об'єктів, на яких здійснюється пошук, вимір простору, і тд. Відкриті проблеми даного напрямку в більшості випадків полягають в покращенні швидкості роботи, або зменшенні пам'яті існуючих алгоритмів. Для деяких задач (наприклад, задача комівояжера, пошук оптимального шляху з перешкодами в тривимірному просторі), доведено що вони є NP-складними, тобто суттєво покращити існуючі алгоритми неможливо. При цьому для інших класів задач, наприклад пошук оптимального шляху на многогранній поверхні, можливе покращення часової оцінки складності алгоритму за рахунок використання більш вдалої структури даних, що і планується втілити в наступних роботах.

5. Cheriton D. Finding minimum spanning trees / D. Cheriton, R. E. Tarjan. - SIAM J. Comput. - 1976. - P. 724-742.
6. Garey M. R. The complexity of computing Steiner minimal trees / M. R. Garey, R. L. Graham, D. S. Johnson. - SIAM J. Appl. Math. - 1977. - P. 835-859.
7. Papadimitriou C. H. The Euclidean traveling salesman problem is NP-complete / C. H. Papadimitriou. - Theoret. Comput. Sci. - 1977. - P. 237-244.
8. Lee D. T. Euclidean shortest paths in the presence of rectilinear barriers / D. T. Lee, F. P. Preparata. - Networks 14. - 1984. - P. 393-410.
9. Chen J. Shortest paths on a polyhedron / J. Chen, Y. Han. - In Proc. 6th Annu. ACM Sympos. Comput. Geom. - 1990. - P. 360-369.

10. Reif J. H. A single-exponential upper bound for finding shortest paths in three dimensions / J. H. Reif, J. A. Storer. - J. ACM – 1994. - P. 1013-1019.
 11. Sharir M. On shortest paths in polyhedral spaces / M. Sharir, A. Schorr. - SIAM J. Comput. - 1986. - P. 193-215.
 12. Mitchell J. S. B. Guillotine subdivisions approximate polygonal subdivisions: A simple new method for the geometric k-MST problem / J. S. B. Mitchell. - In Proc. 7th ACM-SIAM Sympos // Discrete Algorithms – 1996. - P. 402-408.
 13. Clarkson K. L. Approximation algorithms for shortest path motion planning / K. L. Clarkson. - In Proc. 19th Annu. ACM Sympos. Theory Comput. - 1986. - P. 56-65.
 14. Varadarajan K. R. Approximating shortest paths on a nonconvex polyhedron / K. R. Varadarajan, P. Agarwal. - In Proc. 38th Annu. IEEE Sympos. Found. Comput. Sci. - 1997. - P. 132.
 15. Препарата Ф. Вычислительная геометрия: Введение / Ф. Препарата, М. Шеймос. - [пер. с англ.] – 1989. - P. 117.
 16. Edelsbrunner E. Optimal point location in a monotone subdivision / E. Edelsbrunner, L.J. Guibas, J. Stolfi. - SIAM J. Computing. – 1986. – № 15(2). – P. 317-340.
 17. Lester P. A* Pathfinding for Beginners / P. Lester. – 21 Oct. 2006 [Електронний ресурс]. – Режим доступу : <http://www.policyalmanac.org/games/aStarTutorial.htm>
 18. Mitchell J. S. B. Geometric Shortest Paths and Network Optimization / J. S. B. Mitchell. – 1998. - P. 320-334.
 19. Kapoor S. An efficient algorithm for Euclidean shortest paths among polygonal obstacles in the plane / S. Kapoor, S. N. Maheshwari, J. S. B. Mitchell. - Discrete Comput. Geom. - 1997. - P. 377-383.
 20. Chazelle B. A theorem on polygon cutting with applications / B. Chazelle. - In Proc. 23rd Annu. IEEE Sympos. Found. Comput. Sci. - 1982. - P. 339-349.
 21. Chazelle B. Triangulating a simple polygon in linear time / B. Chazelle. - Discrete Comput. Geom. - 1991. - P. 485-524.
 22. Guibas L. J. Optimal shortest path queries in a simple polygon / L. J. Guibas, J. Hershberger. - J. Comput. Syst. Sci. - 1989. - P. 126-152.
 23. Терещенко В.Н. Подход к поиску оптимального пути между двумя точками на множестве преград / В. Н. Терещенко, Д. Янчик, Д. Пустовойтов, Е. Чернышов. - Штучний інтелект — 2010. - P. 113-119.
 24. Терещенко В. М. Побудова мінімального шляху на многогранній поверхні в R3 / В. М. Терещенко. - Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка — 2012. - P. 57-64.
 25. Терещенко В. М. Пошук мінімального зв'язаного шляху у простому многокутнику / В. М. Терещенко, А. С. Трегубенко. - Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка – 2012. - P. 95-99.
 26. Lee D. T. On finding the convex hull of a simple polygon / D. T. Lee. - IJCIS, Vol.12, No. 2 -1983. — P. 87-98.
 27. Mitchell J. S. B. The discrete geodesic problem / J. S. B. Mitchell, D. M. Mount, C. H. Papadimitriou. - SIAM J. Computing – 1987. P. 1260-1264.
- ### References
1. RIVIERE S. (1995) *Topologically sweeping the visibility complex of polygonal scenes*. In Proc. 11th Annu. ACM Sympos. Comput. Geom, p. 36-37.
 2. MAHESHWARI A., SACK J-R. (1998) *Link distance problems*. J.-R. Sack and J. Urrutia, editors, Handbook of Computational Geometry, Elsevier Science Publishers B.V. North-Holland, Amsterdam, p.39.
 3. FREDMAN M., TARJAN R. E. (1987) *Fibonacci heaps and their uses in improved network optimization problems*. J. ACM, p. 34:596-615.
 4. MITCHELL J. S. B. (1992) *L1 shortest paths among polygonal obstacles in the plane*. Algorithmica, p. 8:55-88.
 5. CHERITON D., TARJAN R. E. (1976) *Finding minimum spanning trees*. SIAM J. Comput., p. 5:724-742.
 6. GAREY M. R., GRAHAM R. L., JOHNSON D. S. (1977) *The complexity of computing Steiner minimal trees*. SIAM J. Appl. Math., p. 32:835-859.
 7. PAPADIMITRIOU C. H. (1977) *The Euclidean traveling salesman problem is NP-complete*. Theoret. Comput., p. 4:237-244.
 8. LEE D. T., PREPARATA F. P. (1984) *Euclidean shortest paths in the presence of*

- rectilinear barriers*. Networks 14, p. 14:393-410.
9. CHEN J., HAN Y. (1990) *Shortest paths on a polyhedron*. In Proc. 6th Annu. ACM Sympos. Comput. Geom., p. 360-369.
 10. REIF J. H., STORER J. A. (1994) *A single-exponential upper bound for finding shortest paths in three dimensions*. J. ACM p. 41(5):1013-1019.
 11. SHARIR M., SCHORR A. (1986) *On shortest paths in polyhedral spaces*. SIAM J. Comput. p. 15:193-215.
 12. MITCHELL J. S. B. (1996) *Guillotine subdivisions approximate polygonal subdivisions: A simple new method for the geometric k-MST problem*. In Proc. 7th ACM-SIAM Sympos Discrete Algorithms, p. 402-408.
 13. CLARKSON K. L. (1986) *Approximation algorithms for shortest path motion planning*. In Proc. 19th Annu. ACM Sympos. Theory Comput., p. 56-65.
 14. VARADARAJAN K. R., AGARWAL P. (1997) *Approximating shortest paths on a nonconvex polyhedron*. In Proc. 38th Annu. IEEE Sympos. Found. Comput. Sci., p. 132.
 15. PREPARTA F. (1989) *Vychyslitelnaia geometriia: Vvedenie*. Preparta F., Sheymos M., p. 117.
 16. EDELSBRUNNER E. (1986) *Optimal point location in a monotone subdivision*. E. Edelsbrunner, L.J. Guibas, J. Stolfi, SIAM J. Computing, № 15(2), p. 317-340.
 17. LESTER PATRICK. (21 Oct. 2006) *A* Pathfinding for Beginners*. Available from: <http://www.policyalmanac.org/games/aStarTutorial.htm>
 18. MITCHELL J. S. B. (1998) *Geometric Shortest Paths and Network Optimization*. p. 320-334.
 19. KAPOOR S., MAHESHWARI S. N., MITCHELL J. S. B. (1997) *An efficient algorithm for Euclidean shortest paths among polygonal obstacles in the plane*. Discrete Comput. Geom., p. 18:377-383.
 20. CHAZELLE B. (1982) *A theorem on polygon cutting with applications*. In Proc. 23rd Annu. IEEE Sympos. Found. Comput. Sci., p. 339-349.
 21. CHAZELLE B. (1991) *Triangulating a simple polygon in linear time*. Discrete Comput. Geom., p. 6:485-524.
 22. GUIBAS L. J. HERSHBERGER J. (1989) *Optimal shortest path queries in a simple polygon*. J. Comput. Syst. Sci. - P. 39:126-152.
 23. TERESHCHENKO V.N., YANCHIK D., PUSTOVOYTOV D., CHERNISHOV E. (2010) *An Approach to finding the optimal path between two points on a set of obstacles*. Shtuchnyi intelekt, p. 113-119.
 24. TERESHCHENKO V.N. (2012) *Constructing minimum path on the polyhedral surface in R3*. Taras Shevchenko National University of Kyiv's visnyk, p. 57-64.
 25. TERESHCHENKO V.N., TREGUBENKO A.S. (2012) *Finding a minimum link path within a simple polygon*. Taras Shevchenko National University of Kyiv's visnyk, p. 95-99.
 26. LEE D. T. (1983) *On finding the convex hull of a simple polygon*. IJCS, Vol.12, No. 2, p. 87-98.
 27. MITCHELL J.S.B. MOUNT D. M. PAPADIMITRIOU C. H. (1987) *The discrete geodesic problem*. SIAM J. Computing, p. 1260-1264.
- Надійшла до редколегії 17.09.15

УДК 004.42:510.69

Шкільняк О.С., к. ф.-м. н., доцент

**Модальні логіки немонотонних
часткових предикатів**

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

O.S. Shkilniak, PhD, Associate Professor.

**Modal logics of non-monotone partial
predicates**

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

Досліджено нові класи програмно-орієнтованих логічних формалізмів – чисті першопорядкові транзитивні модальні логіки часткових немонотонних предикатів. Описано властивості відношення логічного наслідку для множин специфікованих станами формул. На цій основі для модальних логік немонотонних предикатів запропоновано числення секвенційного типу. Вказано умови замкненості секвенцій, описано різновиди таких числень, наведено відповідні секвенційні форми.

Ключові слова: модальна логіка, предикат, логічний наслідок, секвенційне числення.

Modal logics have many applications in various fields such as theoretical and applied computer science, philosophy and linguistics. They are usually based on classical predicate logic. However, classical logic has some fundamental restrictions which don't allow taking into account sufficiently incompleteness and partiality of information. Composition-nominative modal logics of partial quasiary predicates is a program-oriented logical formalism based on wide classes of partial mappings over nominative data combined with modal logics. Modal transitional logics (MTL) of partial quasiary predicates are its important variant. In this paper we consider MTL of partial predicates without monotonicity restriction. We study semantic properties of MTL of non-monotone predicates. Depending on restrictions on the transition relation, a number of different classes of MTL can be distinguished. We describe properties of logical consequence relations for sets of formulas specified with states. Then, basing on the defined properties of logical consequence relations, we construct corresponding sequent calculi. We specify various classes of sequent calculi of MTL of non-monotone predicates and reproduce the sequent forms.

Key words: modal logic, predicate, logical sequence, sequent calculus.

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Буй Д.Б.

Апарат математичної логіки є основою сучасних інформаційних і програмних систем. Для опису й моделювання різноманітних предметних областей, специфікації та верифікації програм, для опису інформаційних та експертних систем в останній час успішно використовуються поняття і засоби модальних логік. Традиційні модальні логіки (див., напр., [1]) базуються на класичній логіці предикатів. Проте ця логіка має (див. [2]) принципові обмеження, що ускладнює її застосування в інформатиці й програмуванні. Це зумовлює необхідність побудови програмно-орієнтованих класів логічних формалізмів. Такими формалізмами модального типу є композиційно-номінативні модальні логіки (КНМЛ), які синтезують можливості традиційних модальних логік і композиційно-номінативних логік часткових ква-

зіарних предикатів [2]. Важливим класом КНМЛ є транзитивні модальні логіки (ТМЛ), вони відбивають аспект зміни й розвитку предметних областей. В даній роботі вивчаються ТМЛ часткових квазіарних предикатів без обмеження монотонності. Такі логіки запропоновано в [3], семантичні аспекти цих логік розглянуто в [3, 4].

Метою даної роботи є дослідження семантичних властивостей чистих першопорядкових ТМЛ немонотонних часткових предикатів та побудова для цих логік числень секвенційного типу. Основою такої побудови є властивості відношень логічного наслідку для множин специфікованих станами формул. Описано різновиди цих числень, наведено відповідні секвенційні форми.

Поняття, які не визначаються в даній статті, тлумачимо в сенсі робіт [2–4].

1. Транзиційні модальні системи

Поняття композиційно-номінативної модальної системи (КНМС) є центральним поняттям КНМЛ. Важливим класом КНМС є транзиційні модальні системи (ТМС).

ТМС – це об'єкт вигляду $M = (Cms, Fm, Im)$, де $Cms = (S, R, Pr, C)$ – композиційна модальна система (вона задає семантичні аспекти світу), Fm – множина формул мови КНМЛ, Im – відображення інтерпретації формул на станах світу. Тут S – множина станів світу, R – множина відношень на S вигляду $R \subseteq S \times S$ (тракуємо їх як відношення переходу на станах), Pr – множина предикатів на станах, C – множина композицій на Pr .

Ми розглядаємо чисті першопорядкові ТМС. Для них S – це множина алгебр (алгебраїчних систем) вигляду $\alpha = (A_\alpha, Pr_\alpha)$, де Pr_α – множина квазіарних предикатів вигляду ${}^V A_\alpha \rightarrow \{T, F\}$, $A = \bigcup_{\alpha \in S} A_\alpha$ – множина усіх базових даних світу.

Предикати із Pr_α назвемо *предикатами стану* α . Предикати вигляду ${}^V A \rightarrow \{T, F\}$ – *глобальні*.

Для чистих першопорядкових КНМЛ множина композицій задається базовими загальнологічними композиціями $\neg, \vee, R_x^{\bar{v}}, \exists x$ та базовими модальними композиціями.

Нагадаємо, що V - A -квазіарний предикат – це функція вигляду ${}^V A \rightarrow \{T, F\}$, де ${}^V A$ – множина всіх V - A -іменних множин (ІМ).

Для ІМ задаємо (див. [2]) операції $\|_{\neg x}, \nabla, r_x^{\bar{v}}$.

Квазіарний предикат P еквітонний (монотонний), якщо: $P(d) \downarrow$ та $d \subseteq d' \Rightarrow P(d) \downarrow = P(d')$.

Кожний предикат $P : {}^V A \rightarrow \{T, F\}$ визначається областю істинності та областю хибності, які предиката $P : {}^V A \rightarrow \{T, F\}$ задаються так:

$$T(P) = \{d \in {}^V A \mid P(d) = T\},$$

$$F(P) = \{d \in {}^V A \mid P(d) = F\}.$$

Предикат $P : {}^V A \rightarrow \{T, F\}$ (частково) істинний, або неспростовний, якщо $F(P) = \emptyset$.

Композиції $\neg$ та $\vee$ задамо через області істинності й хибності відповідних предикатів:

$$T(\neg P) = F(P), \quad F(\neg P) = T(P);$$

$$T(P \vee Q) = T(P) \cup T(Q), \quad F(P \vee Q) = F(P) \cap F(Q).$$

Композиція реномінації $R_x^{\bar{v}}$ визначається так:

$$R_x^{\bar{v}}(f)(d) = f(r_x^{\bar{v}}(d)).$$

Мультимодальні ТМС (ММС) – це ТМС із $R = \{\triangleright_i \mid i \in I\}$ та базовими модальними композиціями K_i , $i \in I$, де кожному $\triangleright_i \in R$ зіставлено K_i .

ТМС, в яких $R = \{\triangleright\}$, а базова модальна композиція – це $\Box$ (необхідно), названо *загальними*.

Загальні ТМС є окремим випадком ММС.

Темпоральні ТМС (ТмМС) – це ТМС, у яких $R = \{\triangleright\}$, а базовими модальними композиціями є $\Box \uparrow$ (завжди буде) та $\Box \downarrow$ (завжди було).

Опишемо мову ТМС. Алфавіт мови: множина V предметних імен; множина Ps предикатних символів (сигнатура мови); символи базових композицій $\neg, \vee, R_x^{\bar{v}}, \exists x$; множина Ms символів базових модальних композицій (модальна сигнатура).

Множину Fm формул мови визначаємо індуктивно. Маємо $Ps \subseteq Fm$; а далі задаємо:

$$\Phi, \Psi \in Fm \Rightarrow \neg \Phi, \vee \Phi \Psi, R_x^{\bar{v}} \Phi, \exists x \Phi \in Fm;$$

$$\Phi \in Fm \text{ та } \mathfrak{H} \in Ms \Rightarrow \mathfrak{H} \Phi \in Fm.$$

Тун КНМС задається її модальною сигнатурою Ms , однотипністю відношень із R для кожного $\mathfrak{H} \in Ms$ та сигнатурою синтетичної неістотності [2].

Задамо відображення інтерпретації атомарних формул на станах $Im : Ps \times S \rightarrow Pr$. При цьому має бути $Im(p, \alpha) \in Pr_\alpha$ (базові предикати є предикатами станів). Продовжимо Im до відображення $Im : Fm \times S \rightarrow Pr$ інтерпретації формул на станах:

$$Im(\neg, \alpha) = \neg(Im(\Phi, \alpha));$$

$$Im(\vee \Phi \Psi, \alpha) = \vee(Im(\Phi, \alpha), Im(\Psi, \alpha));$$

$$Im(R_x^{\bar{v}} \Phi, \alpha) = R_x^{\bar{v}}(Im(\Phi, \alpha));$$

$$Im(\exists x \Phi, \alpha)(d) =$$

$$= \begin{cases} T, & \text{якщо існує } a \in A_\alpha : Im(\Phi, \alpha)(d \nabla x \mapsto a) = T, \\ F, & \text{якщо } Im(\Phi, \alpha)(d \nabla x \mapsto a) = F \text{ для всіх } a \in A_\alpha, \\ \text{невизначене} & \text{в усіх інших випадках.} \end{cases}$$

Предикати, які є значеннями немодалізованих формул (при їх побудові не використовуються символи із Ms), належать до предикатів станів.

Визначення Im для формул вигляду $\mathfrak{H} \Phi$ конкретизуємо залежно від різновидності ТМС.

Розглядаємо випадки загальних ТМС і ТмМС.

Для кожних $\alpha \in S$ і $d \in {}^V A$ задамо:

$$Im(\Box \Phi, \alpha)(d) =$$

$$= \begin{cases} T, & \text{якщо } Im(\Phi, \delta)(d) = T \text{ для всіх } \delta \in S : \alpha \triangleright \delta, \\ F, & \text{якщо існує } \delta \in S : \alpha \triangleright \delta \text{ та } Im(\Phi, \delta)(d) = F, \\ \text{невизначене} & \text{в усіх інших випадках;} \end{cases}$$

$$Im(\Box \uparrow \Phi, \alpha)(d) =$$

$$= \begin{cases} T, & \text{якщо } Im(\Phi, \delta)(d) = T \text{ для всіх } \delta \in S : \alpha \triangleright \delta, \\ F, & \text{якщо існує } \delta \in S : \alpha \triangleright \delta \text{ та } Im(\Phi, \delta)(d) = F, \\ \text{невизначене} & \text{в усіх інших випадках;} \end{cases}$$

$$Im(\Box \downarrow \Phi, \alpha)(d) =$$

$$= \begin{cases} T, & \text{якщо } Im(\Phi, \delta)(d) = T \text{ для всіх } \delta \in S : \delta \triangleright \alpha, \\ F, & \text{якщо існує } \delta \in S : \delta \triangleright \alpha \text{ та } Im(\Phi, \delta)(d) = F, \\ \text{невизначене} & \text{в усіх інших випадках.} \end{cases}$$

Якщо для $\alpha \in S$ не існує такого β , що $\alpha \triangleright \beta$, то для кожного $d \in {}^V A$ вважаємо $Im(\Box \Phi, \alpha)(d) \uparrow$ та $Im(\Box \uparrow \Phi, \alpha)(d) \uparrow$.

Якщо для $\alpha \in S$ не існує такого β , що $\beta \triangleright \alpha$, то для кожного $d \in {}^V A$ вважаємо $Im(\Box_d \Phi, \alpha)(d) \uparrow$.

Предикат $Im(\Phi, \alpha)$, який є значенням формули Φ у стані α , позначаємо Φ_α .

Формула Φ істинна в ТМС M (позн. $M \models \Phi$), якщо Φ_α неспростовний для всіх $\alpha \in S$. Формула Φ неспростовна (частково істинна), що позн. $\models \Phi$, якщо $M \models \Phi$ для всіх ТМС M одного типу.

Залежно від умов, накладених на відношення переходу, можна визначати різні класи ТМС. Традиційно розглядають випадки, коли ці відношення рефлексивні, симетричні чи транзитивні.

ММС із скінченними множинами однотипних відношень переходу назвемо *епістемічними*, або ММС епістемічного типу. Загальні ТМС можна трактувати як окремий випадок епістемічних.

Якщо всі відношення переходу рефлексивні, то в назві ТМС пишемо R ; якщо транзитивні, то пишемо T ; якщо симетричні, то пишемо S .

Маємо такі типи загальних ТМС, ММС, ТмМС:

R -ТМС, T -ТМС, S -ТМС, RT -ТМС,
 RS -ТМС, TS -ТМС, RTS -ТМС;
 R -ММС, T -ММС, S -ММС, RT -ММС,
 RS -ММС, TS -ММС, RTS -ММС;
 R -ТмМС, T -ТмМС, S -ТмМС, RT -ТмМС,
 RS -ТмМС, TS -ТмМС, RTS -ТмМС.

Розглянемо взаємодію в ТМС модальних композицій із реномінаціями та кванторами.

Символи модальних композицій можна проносити [3] через реномінації.

Теорема 1. Для кожних $\mathfrak{K} \in Ms$, $\Phi \in Fm$, $d \in {}^V A$ маємо $R_{\bar{x}}^{\bar{v}} \mathfrak{K} \Phi(d) = \mathfrak{K} R_{\bar{x}}^{\bar{v}} \Phi(d)$.

Звідси отримуємо, що кожна формула вигляду $R_{\bar{x}}^{\bar{v}} \mathfrak{K} \Phi \leftrightarrow \mathfrak{K} R_{\bar{x}}^{\bar{v}} \Phi$ неспростовна (частково істинна).

Для ТМЛ еквітонних предикатів формули вигляду $\mathfrak{K} \forall x \Phi \rightarrow \forall x \mathfrak{K} \Phi$ та $\exists x \mathfrak{K} \Phi \rightarrow \mathfrak{K} \exists x \Phi$ неспростовні. Це не так для загального випадку ТМЛ немонотонних (нееквітонних) предикатів.

Зокрема, в [3, 4] для формул $\Box \forall x \Phi \rightarrow \forall x \Box \Phi$ та $\exists x \Box \Phi \rightarrow \Box \exists x \Phi$ побудовані контрмоделі – ТМС, в яких ці формули спростовуються.

Водночас [3] формули $\Box \exists x \Phi \rightarrow \exists x \Box \Phi$ та $\forall x \Box \Phi \rightarrow \Box \forall x \Phi$ спростовуються вже для ТМЛ еквітонних предикатів. Отже, формули вигляду $\forall x \mathfrak{K} \Phi \rightarrow \mathfrak{K} \forall x \Phi$ і $\mathfrak{K} \exists x \Phi \rightarrow \exists x \mathfrak{K} \Phi$ не є істинними.

2. Відношення логічного наслідку

Специфіковані станом формули мають вигляд Φ^α , де Φ – формула мови, α – її специфікація (відмітка). Тут $\alpha \in S$, де S – множина імен станів.

Нехай M – ТМС із множиною станів світу S , Γ – множина специфікованих станами формул.

Нехай ці специфікації утворюють множину S . Γ узгоджена із M , якщо задана ін'єкція S у S .

Нехай Δ та Γ – множини специфікованих станами формул.

Δ є логічним наслідком Γ в узгодженій із ними ТМС M (позн. $\Gamma_M \models \Delta$), якщо для всіх $d \in {}^V A$ маємо: із того, що $\Phi_\alpha(d) = T$ для всіх $\Phi^\alpha \in \Gamma$, випливає, що неможливо $\Psi_\beta(d) = F$ для всіх $\Psi^\beta \in \Delta$.

Надалі запис $\Gamma_M \models \Delta$ завжди означає узгодженість ТМС M із Γ та Δ .

Звідси випливає, що $\Gamma_M \not\models \Delta \Leftrightarrow$ існує $d \in {}^V A$:

для всіх $\Phi^\alpha \in \Gamma$ маємо $\Phi_\alpha(d) = T$ та

для всіх $\Psi^\beta \in \Delta$ маємо $\Psi_\beta(d) = F$.

Δ є логічним наслідком Γ (відносно ТМС певного типу), якщо $\Gamma_M \models \Delta$ для всіх ТМС M відповідного типу. Цей факт позначаємо $\Gamma \models \Delta$.

Звідси випливає: $\Gamma \not\models \Delta \Leftrightarrow$ існують узгоджена із Γ та Δ ТМС M та $d \in {}^V A$ такі, що для всіх $\Phi^\alpha \in \Gamma$ маємо $\Phi_\alpha(d) = T$ та для всіх $\Psi^\beta \in \Delta$ маємо $\Psi_\beta(d) = F$.

Наведемо властивості відношення наслідку для множин специфікованих станами формул в даній ТМС. Немодальні властивості фактично повторюють відповідні властивості наслідку для множин формул логіки квазіарних предикатів.

У) нехай $\Gamma \subseteq Y$, $\Delta \subseteq \Sigma$. Тоді $\Gamma_M \models \Delta \Rightarrow Y_M \models \Sigma$;

С) якщо $\Gamma \cap \Delta \neq \emptyset$, то $\Gamma_M \models \Delta$.

Властивість С гарантує наявність наслідку.

$\neg_L$) $\neg \Phi^\alpha, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, \Phi^\alpha$;

$\neg_R$) $\Gamma_M \models \Delta, \neg \Phi^\alpha \Leftrightarrow \Phi^\alpha, \Gamma_M \models \Delta$;

$\vee_L$) $\Phi \vee \Psi^\alpha, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow \Phi^\alpha, \Gamma_M \models \Delta$ та $\Psi^\alpha, \Gamma_M \models \Delta$;

$\vee_R$) $\Gamma_M \models \Delta, \Phi \vee \Psi^\alpha \Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, \Phi^\alpha, \Psi^\alpha$;

RI_L) $R_{z,\bar{x}}^{z,\bar{v}}(\Phi)^\alpha, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^\alpha, \Gamma_M \models \Delta$;

RI_R) $\Gamma_M \models \Delta, R_{z,\bar{x}}^{z,\bar{v}}(\Phi)^\alpha \Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^\alpha$;

RU_L) $R_{z,\bar{x}}^{y,\bar{v}}(\Phi)^\alpha, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^\alpha, \Gamma_M \models \Delta$;

RU_R) $\Gamma_M \models \Delta, R_{z,\bar{x}}^{y,\bar{v}}(\Phi)^\alpha \Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^\alpha$.

Для RU_L та RU_R умова $y \in v(\Phi)$.

$R\neg_L$) $R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\neg \Phi)^\alpha, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow \neg R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^\alpha, \Gamma_M \models \Delta$;

$R\neg_R$) $\Gamma_M \models \Delta, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\neg \Phi)^\alpha \Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, \neg R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^\alpha$;

$R\vee_L$) $R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi \vee \Psi)^\alpha, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^\alpha \vee R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Psi)^\alpha, \Gamma_M \models \Delta$;

$R\vee_R$) $\Gamma_M \models \Delta, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi \vee \Psi)^\alpha \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^\alpha \vee R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Psi)^\alpha$;

RR_L) $R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(R_{\bar{y}}^{\bar{w}}(\Phi))^\alpha, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow R_{\bar{x}}^{\bar{v}} \circ_{\bar{y}}^{\bar{w}}(\Phi)^\alpha, \Gamma_M \models \Delta$;

RR_R) $\Gamma_M \models \Delta, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(R_{\bar{y}}^{\bar{w}}(\Phi))^\alpha \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, R_{\bar{x}}^{\bar{v}} \circ_{\bar{y}}^{\bar{w}}(\Phi)^\alpha$.

$$R\exists_L) R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\exists y\Phi)^{\alpha}, \Gamma \models \Delta \Leftrightarrow \exists y R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^{\alpha}, \Gamma \models \Delta;$$

$$R\exists_R) \Gamma \models \Delta, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\exists y\Phi)^{\alpha} \Leftrightarrow \Gamma \models \Delta, \exists y R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^{\alpha}.$$

Для $R\exists_L$ та $R\exists_R$ умова $y \notin \{\bar{v}, \bar{x}\}$.

$$R\exists\exists_L) R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\exists y\Phi)^{\alpha}, \Gamma \models \Delta \Leftrightarrow \exists z R_{\bar{x}}^{\bar{v}} \circ_z^y (\Phi)^{\alpha}, \Gamma \models \Delta;$$

$$R\exists\exists_R) \Gamma \models \Delta, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\exists y\Phi)^{\alpha} \Leftrightarrow \Gamma \models \Delta, \exists z R_{\bar{x}}^{\bar{v}} \circ_z^y (\Phi)^{\alpha}.$$

Для $R\exists\exists_L$ та $R\exists\exists_R$ умова $z \in V_T$, $z \notin nm(R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\exists x\Phi))$.

Для опису елімінації кванторів ТМЛ немоно-
тонних предикатів використаємо спеціальні
предикати-індикатори εz наявності значення для
імені (змінної) $z \in V$. Предикати εz задаємо так:

$$T(\varepsilon z) = \{d \mid d(z) \uparrow\}, F(\varepsilon z) = \{d \mid d(z) \downarrow\}.$$

Наведемо властивості елімінації кванторів:

$$\exists_L) \exists x\Phi, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow R_z^x(\Phi), \Gamma_M \models \Delta, \varepsilon z \text{ за умо-}$$

$$\text{ви } z \in V_T, z \notin nm(\Gamma, \Delta, \exists x\Phi));$$

$$\exists v_R) \Gamma_M \models \Delta, \exists x\Phi, \varepsilon y \Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, \exists x\Phi, R_y^x(\Phi), \varepsilon y.$$

Допоміжні властивості ε -розподілу та первіс-
ного означення:

$$\varepsilon d) \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow \varepsilon y^{\alpha}, \Gamma_M \models \Delta \text{ та } \Gamma_M \models \Delta, \varepsilon y^{\alpha};$$

$$\varepsilon v) \Gamma \models \Delta \Leftrightarrow \Gamma \models \Delta, \varepsilon z^{\alpha}, \text{ де } z \in V_T \text{ та } z \notin nm(\Gamma, \Delta).$$

Наведемо властивості, пов'язані з модальними
композиціями (тут $\mathfrak{K} \in Ms$):

$$R\mathfrak{K}_L) \Gamma, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\mathfrak{K}\Phi)^{\alpha} \models \Delta \Leftrightarrow \Gamma, \mathfrak{K}R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^{\alpha} \models \Delta;$$

$$R\mathfrak{K}_R) \Gamma_M \models \Delta, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\mathfrak{K}\Phi)^{\alpha} \Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, \mathfrak{K}R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(\Phi)^{\alpha}.$$

Зокрема, для ММС маємо властивості RK_{iL} та
 RK_{iR} , де $K_i \in Ms$; для загальних ТМС – $R\Box_L$ та
 $R\Box_R$; для ТмМС – $R\Box_{\uparrow L}$, $R\Box_{\downarrow L}$, $R\Box_{\uparrow R}$ та $R\Box_{\downarrow R}$.

Тепер властивості елімінації модальностей.

У випадку загальних ТМС маємо:

$$\Box_L) \Box\Phi^{\alpha}, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow \{\Phi^{\beta} \mid \alpha \triangleright \beta\} \cup \Gamma_M \models \Delta;$$

$$\Box_R) \Gamma_M \models \Delta, \Box\Phi^{\alpha} \Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, \Phi^{\beta} \text{ для всіх ста-}$$

нів $\beta \in S$ таких, що $\alpha \triangleright \beta$.

У випадку ТмМС $\Box_L$ та $\Box_R$ розщеплюються:

$$\Box_{\uparrow L) \Box_{\uparrow}\Phi^{\alpha}, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow \{\Phi^{\beta} \mid \alpha \triangleright \beta\} \cup \Gamma_M \models \Delta;$$

$$\Box_{\uparrow R) \Gamma_M \models \Delta, \Box_{\uparrow}\Phi^{\alpha} \Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, \Phi^{\beta} \text{ для всіх}$$

станів $\beta \in S$ таких, що $\alpha \triangleright \beta$;

$$\Box_{\downarrow L) \Box_{\downarrow}\Phi^{\alpha}, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow \{\Phi^{\beta} \mid \beta \triangleright \alpha\} \cup \Gamma_M \models \Delta;$$

$$\Box_{\downarrow R) \Gamma_M \models \Delta, \Box_{\downarrow}\Phi^{\alpha} \Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, \Phi^{\beta} \text{ для всіх}$$

станів $\beta \in S$ таких, що $\beta \triangleright \alpha$.

Для ММС маємо аналогічні до $\Box_L$ та $\Box_R$ влас-

тивості K_{iL} та K_{iR} (тут $K_i \in Ms$).

Доведемо для прикладу властивості $\Box_L$ та $\Box_R$.

Доводимо $\Rightarrow$ для $\Box_L$:

$$\Box\Phi^{\alpha}, \Gamma_M \models \Delta \Rightarrow \{\Phi^{\beta} \mid \alpha \triangleright \beta\} \cup \Gamma_M \models \Delta.$$

Припустимо супротивне: $\Box\Phi^{\alpha}, \Gamma_M \models \Delta$ та
 $\{\Phi^{\beta} \mid \alpha \triangleright \beta\} \cup \Gamma_M \not\models \Delta$. Тоді із останнього для деякого
 $d \in {}^V A$ маємо: $\Phi_{\beta}(d) = T$ для всіх β таких, що $\alpha \triangleright \beta$,

$\Phi_{\gamma}(d) = T$ для всіх $\gamma \in \Gamma$, $\Psi_{\gamma}(d) = F$ для всіх $\Psi^{\gamma} \in \Delta$. Із
умови $\Phi_{\beta}(d) = T$ для всіх β таких, що $\alpha \triangleright \beta$, має-
мо $\Box\Phi_{\alpha}(d) = T$. Тоді $\Box\Phi^{\alpha}, \Gamma_M \not\models \Delta$ – суперечність.

Доводимо $\Leftarrow$ для $\Box_L$:

$$\{\Phi^{\beta} \mid \alpha \triangleright \beta\} \cup \Gamma_M \models \Delta \Rightarrow \Box\Phi^{\alpha}, \Gamma_M \models \Delta.$$

Припустимо супротивне: $\{\Phi^{\beta} \mid \alpha \triangleright \beta\} \cup \Gamma_M \models \Delta$
та $\Box\Phi^{\alpha}, \Gamma_M \not\models \Delta$. Останнє означає, що для
деякого $d \in {}^V A$ маємо: $\Box\Phi_{\alpha}(d) = T$, $\Phi_{\gamma}(d) = T$ для
всіх $\gamma \in \Gamma$, $\Psi_{\gamma}(d) = F$ для всіх $\Psi^{\gamma} \in \Delta$. Із умови
 $\Box\Phi_{\alpha}(d) = T$ маємо $\Phi_{\beta}(d) = T$ для всіх β таких, що
 $\alpha \triangleright \beta$. Тоді $\{\Phi^{\beta} \mid \alpha \triangleright \beta\} \cup \Gamma_M \not\models \Delta$ – суперечність.

Доводимо $\Rightarrow$ для $\Box_R$: $\Gamma_M \models \Delta$, $\Box\Phi^{\alpha} \Rightarrow$
 $\Rightarrow \Gamma_M \models \Delta$, Φ^{β} для всіх $\beta \in S$ таких, що $\alpha \triangleright \beta$.

Нехай супротивне: $\Gamma_M \models \Delta$, $\Box\Phi^{\alpha}$ та $\Gamma_M \not\models \Delta$, Φ^{β}
для деякого β такого, що $\alpha \triangleright \beta$. Останнє означає,
що для деякого $d \in {}^V A$ маємо: $\Phi_{\gamma}(d) = T$ для всіх
 $\gamma \in \Gamma$, $\Psi_{\gamma}(d) = F$ для всіх $\Psi^{\gamma} \in \Delta$, $\Phi_{\beta}(d) = F$. Проте із
умови $\Phi_{\beta}(d) = F$ для β такого, що $\alpha \triangleright \beta$, маємо
 $\Box\Phi_{\alpha}(d) = F$, звідки $\Gamma_M \not\models \Delta$, $\Box\Phi^{\alpha}$ – суперечність.

Доводимо $\Leftarrow$ для $\Box_R$: $\Gamma_M \models \Delta$, Φ^{β} для всіх $\beta \in S$
таких, що $\alpha \triangleright \beta \Rightarrow \Gamma_M \models \Delta$, $\Box\Phi^{\alpha}$.

Припустимо супротивне: $\Gamma_M \models \Delta$, Φ^{β} для всіх
станів $\beta \in S$ таких, що $\alpha \triangleright \beta$, проте $\Gamma_M \not\models \Delta$, $\Box\Phi^{\alpha}$.
Останнє означає, що для деякого $d \in {}^V A$ маємо:
 $\Phi_{\gamma}(d) = T$ для всіх $\gamma \in \Gamma$, $\Psi_{\gamma}(d) = F$ для всіх $\Psi^{\gamma} \in \Delta$,
 $\Box\Phi_{\alpha}(d) = F$. Із $\Box\Phi_{\alpha}(d) = F$ випливає, що $\Phi_{\beta}(d) = F$
для деякого $\beta \in S$ такого, що $\alpha \triangleright \beta$, звідки
 $\Gamma_M \not\models \Delta$, Φ^{β} – суперечність.

В подальшому викладі обмежимося розглядом
загальних ТМС.

Властивості відношення наслідку для множин
формул в даній ТМС індукують аналогічні власти-
вості відношення логічного наслідку для множин
формул (пишемо $\models$ замість $\models_M$).

При побудові виведення в секвенційному чис-
ленні ми фактично перевіряємо відсутність логі-
чного наслідку. Тому для розглянутих властивос-
тей відношення $\models$ доцільно вказати відповідні
дуальні властивості відношення $\models \neq$. Враховуючи,
що $P \Leftrightarrow Q$ рівносильне $\neg P \Leftrightarrow \neg Q$, майже для всіх
властивостей відношення $\models$ відповідні власти-
вості відношення $\models \neq$ отримуємо заміною $\models$ на
 $\models \neq$, лише для $\vee_L$ та властивостей вигляду $\mathfrak{K}_R$ дуа-
льні властивості задаємо інакше.

$$\vee_L) \Phi \vee \Psi^{\alpha}, \Gamma_M \models \Delta \Leftrightarrow \Phi^{\alpha}, \Gamma_M \models \Delta \text{ або } \Psi^{\alpha}, \Gamma_M \models \Delta;$$

$$\Box_R) \Gamma_M \models \Delta, \Box\Phi^{\alpha} \Leftrightarrow \Gamma_M \models \Delta, \Phi^{\beta} \text{ для деякого}$$

$\beta \in S$ такого, що $\alpha \triangleright \beta$.

При наявності додаткових властивостей від-
ношень досяжності відповідним чином модифі-
куються властивості елімінації модальностей.

Розглянемо традиційні випадки, коли відношення досяжності можуть бути транзитивними, рефлексивними чи симетричними.

1. $\triangleright$ *рефлексивне*. Маємо $\alpha \triangleright \alpha$, тому для властивості $\sqsubseteq$ маємо $\Phi^\alpha \in \{\Phi^\beta \mid \alpha \triangleright \beta\}$. Властивість $\sqsubseteq$ записується аналогічно загальному випадку.

2. $\triangleright$ *симетричне*. Маємо $\alpha \triangleright \beta \Leftrightarrow \beta \triangleright \alpha$. тому властивості $\sqsubseteq$ та $\sqsupseteq$ записуємо в такому вигляді:
 $\sqsubseteq S \sqsupseteq \Phi^\alpha, \Gamma_M \neq \Delta \Leftrightarrow \{\Phi^\beta \mid \alpha \triangleright \beta \text{ чи } \beta \triangleright \alpha\} \cup \sqsupseteq \Gamma_M \neq \Delta$.

$\sqsupseteq S \sqsupseteq \Gamma_M \neq \Delta, \sqsupseteq \Phi^\alpha \Leftrightarrow \Gamma_M \neq \Delta, \Phi^\beta$ для деякого стану $\beta \in S$ такого, що $\alpha \triangleright \beta$ чи $\beta \triangleright \alpha$.

3. $\triangleright$ *рефлексивне й симетричне*. Маємо $\sqsubseteq S$ та $\sqsubseteq RS \sqsupseteq \Phi^\alpha, \Gamma_M \neq \Delta \Leftrightarrow \{\Phi^\beta \mid \alpha \triangleright \beta \text{ чи } \beta \triangleright \alpha\} \cup \sqsupseteq \Gamma_M \neq \Delta$, причому $\Phi^\alpha \in \{\Phi^\beta \mid \alpha \triangleright \beta \text{ чи } \beta \triangleright \alpha\}$;

4. $\triangleright$ *транзитивне*. Тоді маємо $\sqsubseteq$ та $\sqsubseteq T \sqsupseteq \Phi^\alpha, \Gamma_M \neq \Delta \Leftrightarrow \{\Phi^\beta \mid \alpha \triangleright \beta\} \cup \sqsupseteq \{\sqsupseteq \Phi^\beta \mid \alpha \triangleright \beta\} \cup \sqsupseteq \Gamma_M \neq \Delta$.

Наявність $\{\sqsupseteq \Phi^\beta \mid \alpha \triangleright \beta\} \cup \sqsupseteq$ тут необхідна через транзитивність відношення $\triangleright$.

5. $\triangleright$ *транзитивне та рефлексивне*. У цьому випадку маємо $\sqsubseteq$ та $\sqsubseteq T$, причому в силу $\alpha \triangleright \alpha$ для властивості $\sqsubseteq T$ необхідно $\Phi^\alpha \in \{\Phi^\beta \mid \alpha \triangleright \beta\}$.

6. $\triangleright$ *транзитивне та симетричне*. У цьому випадку маємо $\sqsubseteq S$ та $\sqsubseteq TS \sqsupseteq \Phi^\alpha, \Gamma_M \neq \Delta \Leftrightarrow \{\Phi^\beta \mid \alpha \triangleright \beta \text{ чи } \beta \triangleright \alpha\} \cup \sqsupseteq \{\sqsupseteq \Phi^\beta \mid \alpha \triangleright \beta \text{ чи } \beta \triangleright \alpha\} \cup \sqsupseteq \Gamma_M \neq \Delta$.

7. $\triangleright$ *транзитивне, рефлексивне й симетричне*. Маємо $\sqsubseteq S$ та $\sqsubseteq TS$, причому в силу $\alpha \triangleright \alpha$ для $\sqsubseteq TS$ необхідно $\Phi^\alpha \in \{\Phi^\beta \mid \alpha \triangleright \beta \text{ чи } \beta \triangleright \alpha\}$.

3. Секвенційні числення

Семантичною основою побудови для ТМЛ числень секвенційного типу є властивості відношення логічного наслідку для множин специфікованих станами формул. Специфікації мають вигляд $\alpha \vdash$ чи $\alpha \vdash$, де α – ім'я стану Секвенції трактуємо як множини таких формул. Виділяючи $\vdash$ -формули та $\vdash$ -формули, секвенції позначаємо як $\vdash \Gamma \vdash \Delta$.

Секвенції збагачуємо збудованими на момент виведення множинами відношень на станах. Нехай M – схема моделі світу, тобто збудоване на цей момент відношення досяжності, записане для імен станів. Збагачені секвенції записуємо $\Sigma // M$.

Виведення в секвенційних численнях має вигляд дерева, вершинами якого є секвенції. Такі дерева називають секвенційними.

Аксіомами секвенційного числення є замкнені секвенції. Для замкненої секвенції $\vdash \Gamma \vdash \Delta$ має виконуватись умова $\Gamma \models \Delta$.

Un_α -*unv*-еквівалентність формул ТМЛ визначаємо подібно Un -*unv*-еквівалентності формул логік квазіарних предикатів (див., напр., [5]).

Нехай $Un_\alpha = \{u \in V \mid \alpha \vdash u \in \Sigma\}$ – множина неозначених імен стану α .

Нехай Ψ – формула $R_{S_1, \dots, S_k, Y_1, \dots, Y_n, U_1, \dots, U_m}^{r_1, \dots, r_k, x_1, \dots, x_n, v_1, \dots, v_m} \Phi$ така:

$$\{r_1, \dots, r_k, s, \dots, s_k, y_1, \dots, y_n\} \subseteq Un,$$

$$\{x_1, \dots, x_n, v_1, \dots, v_m\} \cap Un = \emptyset.$$

Un_α -*unv*-формою формули Ψ назовемо вираз

$$R_{\varepsilon, \dots, \varepsilon, v_1, \dots, v_m}^{x_1, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m} \Phi, \text{ де } \varepsilon \text{ – невизначене значення.}$$

Формули Ψ та Ξ Un_α -*unv*-еквівалентні, якщо Ψ та Ξ мають однакові Un_α -*unv*-форми.

Секвенція Σ замкнена, якщо існують префікс стану α та Un_α -*unv*-еквівалентні специфіковані R -формули $\alpha \vdash \Phi$ та $\alpha \vdash \Psi$ такі: $\alpha \vdash \Phi \in \Sigma$ та $\alpha \vdash \Psi \in \Sigma$;

зокрема, якщо існують префікс стану α та формула Φ така: $\alpha \vdash \Phi \in \Sigma$ та $\alpha \vdash \Phi \in \Sigma$.

Секвенція Σ вивідна, якщо існує замкнене секвенційне дерево (всі листи замкнені) з коренем Σ .

Правилами виведення секвенційних числень є секвенційні форми. Вони є синтаксичними аналогами семантичних властивостей відношень $\models$.

Наведемо базові секвенційні форми числень чистих першопорядкових загальних ТМЛ.

Базові загальнологічні форми.

$$\vdash \neg \frac{\alpha \vdash \Phi, \Sigma // M}{\alpha \vdash \neg \Phi, \Sigma // M}; \quad \vdash \neg \frac{\alpha \vdash \Phi, \Sigma // M}{\alpha \vdash \neg \Phi, \Sigma // M};$$

$$\vdash \vee \frac{\alpha \vdash \Phi, \Sigma // M \quad \alpha \vdash \Psi, \Sigma // M}{\alpha \vdash \Phi \vee \Psi, \Sigma // M};$$

$$\vdash \vee \frac{\alpha \vdash \Phi, \alpha \vdash \Psi, \Sigma // M}{\alpha \vdash \Phi \vee \Psi, \Sigma // M};$$

$$\vdash RI \frac{\alpha \vdash R_x^{\bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \vdash R_{z, \bar{x}}^{z, \bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}; \quad \vdash RI \frac{\alpha \vdash R_x^{\bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \vdash R_{z, \bar{x}}^{z, \bar{v}}(\Phi), \Sigma // M};$$

$$\vdash RU \frac{\alpha \vdash R_u^{\bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \vdash R_{z, \bar{u}}^{y, \bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}; \quad \vdash RU \frac{\alpha \vdash R_u^{\bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \vdash R_{z, \bar{u}}^{y, \bar{v}}(\Phi), \Sigma // M};$$

Для форм $\vdash RU$ і $\vdash RU$ умова: $y \in v(\Phi)$.

$$\vdash RR \frac{\alpha \vdash R_x^{\bar{v}} \circ \bar{w} \bar{y}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \vdash R_x^{\bar{v}}(R_y^{\bar{w}}(\Phi)), \Sigma // M};$$

$$\vdash RR \frac{\alpha \vdash R_x^{\bar{v}} \circ \bar{w} \bar{y}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \vdash R_x^{\bar{v}}(R_y^{\bar{w}}(\Phi)), \Sigma // M};$$

$$\vdash R \neg \frac{\alpha \vdash \neg R_x^{\bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \vdash R_x^{\bar{v}}(\neg \Phi), \Sigma // M}; \quad \vdash R \neg \frac{\alpha \vdash \neg R_x^{\bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \vdash R_x^{\bar{v}}(\neg \Phi), \Sigma // M};$$

$$\vdash R \vee \frac{\alpha \vdash R_x^{\bar{v}}(\Phi), \Sigma // M \quad \alpha \vdash R_x^{\bar{v}}(\Psi), \Sigma // M}{\alpha \vdash R_x^{\bar{v}}(\Phi \vee \Psi), \Sigma // M};$$

$$\begin{aligned} & \neg R \vee \frac{\alpha \neg R_x^{\bar{v}}(\Phi), \alpha \neg R_x^{\bar{v}}(\Psi), \Sigma // M}{\alpha \neg R_x^{\bar{v}}(\Phi \vee \Psi), \Sigma // M}; \\ & \vdash R \exists \frac{\alpha \neg \exists y R_x^{\bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \neg R_x^{\bar{v}}(\exists y \Phi), \Sigma // M}; \neg R \exists \frac{\alpha \neg \exists y R_x^{\bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \neg R_x^{\bar{v}}(\exists y \Phi), \Sigma // M}. \end{aligned}$$

Для форм $\vdash R \exists$ і $\neg R \exists$ умова: $y \notin \{\bar{v}, \bar{x}\}$.

$$\begin{aligned} & \vdash R \exists \exists \frac{\alpha \neg \exists z R_x^{\bar{v}} \circ_z^y(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \neg R_x^{\bar{v}}(\exists y \Phi), \Sigma // M}; \\ & \neg R \exists \exists \frac{\alpha \neg \exists z R_x^{\bar{v}} \circ_z^y(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \neg R_x^{\bar{v}}(\exists y \Phi), \Sigma // M}. \end{aligned}$$

Для $\vdash R \exists \exists$ і $\neg R \exists \exists$ умова: $z \in V_T, z \notin nm(R_x^{\bar{v}}(\exists x \Phi))$.

Форми елімінації кванторів:

$$\begin{aligned} & \vdash \frac{\alpha \neg R_z^x(\Phi), \alpha \neg \varepsilon z, \Sigma // M}{\alpha \neg \exists x \Phi, \Sigma // M}, \text{ де } z \in V_T, z \notin nm(\Sigma, \exists x \Phi); \\ & \neg \exists \vee \frac{\alpha \neg \exists x \Phi, \alpha \neg R_y^x(\Phi), \alpha \neg \varepsilon y, \Sigma // M}{\alpha \neg \exists x \Phi, \alpha \neg \varepsilon y, \Sigma // M}. \end{aligned}$$

Форми ε -розподілу:

$$\varepsilon d \frac{\alpha \neg \varepsilon x, \Sigma // M}{\Sigma} \frac{\alpha \neg \varepsilon x, \Sigma // M}{\Sigma}, \text{ де } \alpha \neg \varepsilon x, \alpha \neg \varepsilon x \notin \Sigma;$$

$$\vdash R \Box \frac{\alpha \neg \Box R_x^{\bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \neg R_x^{\bar{v}}(\Box \Phi), \Sigma // M}; \neg R \Box \frac{\alpha \neg \Box R_x^{\bar{v}}(\Phi), \Sigma // M}{\alpha \neg R_x^{\bar{v}}(\Box \Phi), \Sigma // M}.$$

Форми елімінації модальних операторів.

1. На $\triangleright$ не накладені додаткові умови. Маємо CGT-числення.

Якщо для стану α в момент застосування форми елімінації маємо стани $\beta_1, \dots, \beta_n$ такі, що $\alpha \triangleright \beta_1, \dots, \alpha \triangleright \beta_n$, то застосовуємо до $\alpha \neg \Box \Phi$ форму

$$\vdash \Box \frac{\alpha \neg \Box \Phi, \beta_1 \neg \Phi, \dots, \beta_n \neg \Phi, \Sigma // M}{\alpha \neg \Box \Phi, \Sigma // M}.$$

Якщо для стану α в момент застосування до $\alpha \neg \Box \Phi$ форми елімінації немає γ таких, що $\alpha \triangleright \gamma$, то застосовуємо форму (тут β – новий стан):

$$\vdash \Box f \frac{\alpha \neg \Box \Phi, \beta \neg \Phi, \Sigma // M \cup \{\alpha \triangleright \beta\}}{\alpha \neg \Box \Phi, \Sigma // M}.$$

Форма елімінації, яка застосовується до $\alpha \neg \Box \Phi$:

$$\neg \Box \frac{\beta \neg \Phi, \Sigma // M \cup \{\alpha \triangleright \beta\}}{\alpha \neg \Box \Phi, \Sigma // M}, \beta - \text{новий стан.}$$

2. $\triangleright$ рефлексивне. Маємо CGT_R-числення.

Якщо для стану α в момент застосування до $\alpha \neg \Box \Phi$ форми елімінації маємо стани $\beta_1, \dots, \beta_n$ такі, що $\alpha \triangleright \beta_1, \dots, \alpha \triangleright \beta_n$, то застосовуємо форму:

$$\vdash \Box R \frac{\alpha \neg \Box \Phi, \alpha \neg \Phi, \beta_1 \neg \Phi, \dots, \beta_n \neg \Phi, \Sigma // M}{\alpha \neg \Box \Phi, \Sigma // M}.$$

Якщо для стану α в момент застосування до $\alpha \neg \Box \Phi$ форми елімінації немає відмінних від α станів, досяжних із α , то застосовуємо форму:

$$\vdash \Box fR \frac{\alpha \neg \Box \Phi, \alpha \neg \Phi, \Sigma // M}{\alpha \neg \Box \Phi, \Sigma // M}.$$

Форма, яка застосовується до $\alpha \neg \Box \Phi$, – це $\neg \Box$.

3. $\triangleright$ симетричне. Маємо CGT_S-числення.

Якщо в момент застосування форми до $\alpha \neg \Box \Phi$ маємо стани $\beta_1, \dots, \beta_n$ такі, що $\alpha \triangleright \beta_1, \dots, \alpha \triangleright \beta_n$ та $\beta_1 \triangleright \alpha, \dots, \beta_n \triangleright \alpha$, то застосовуємо $\vdash \Box$. Для наявних $\beta_1, \dots, \beta_n$: $\alpha \triangleright \beta_j$ чи $\beta_j \triangleright \alpha$, пишемо $\beta_1 \neg \Phi, \dots, \beta_n \neg \Phi$.

Якщо для стану α в момент застосування до $\alpha \neg \Box \Phi$ форми елімінації немає γ таких, що $\alpha \triangleright \gamma$, то застосовуємо форму (тут β – новий стан):

$$\vdash \Box fS \frac{\alpha \neg \Box \Phi, \beta \neg \Phi, \Sigma // M \cup \{\alpha \triangleright \beta, \beta \triangleright \alpha\}}{\alpha \neg \Box \Phi, \Sigma // M}.$$

До $\alpha \neg \Box \Phi$ застосовується форма

$$\neg \Box S \frac{\beta \neg \Phi, \Sigma // M \cup \{\alpha \triangleright \beta, \beta \triangleright \alpha\}}{\alpha \neg \Box \Phi, \Sigma // M}, \beta - \text{новий стан.}$$

4. $\triangleright$ рефлексивне та симетричне. Отримуємо CGT_RS-числення.

Якщо в момент застосування форми до $\alpha \neg \Box \Phi$ маємо стани $\beta_1, \dots, \beta_n$ такі, що $\alpha \triangleright \beta_1, \dots, \alpha \triangleright \beta_n$ та $\beta_1 \triangleright \alpha, \dots, \beta_n \triangleright \alpha$, то застосовуємо форму $\vdash \Box R$.

Якщо в момент застосування форми до $\alpha \neg \Box \Phi$ для α немає відмінних від α станів, досяжних із α (тут завжди маємо $\alpha \triangleright \alpha$), то застосовуємо $\vdash \Box fR$.

Форма, яка застосовується до $\alpha \neg \Box \Phi$, – це $\neg \Box S$.

5. $\triangleright$ транзитивне. Маємо CGT_T-числення.

Якщо для стану α в момент застосування до $\alpha \neg \Box \Phi$ форми елімінації маємо стани $\beta_1, \dots, \beta_n$ такі, що $\alpha \triangleright \beta_1, \dots, \alpha \triangleright \beta_n$, то застосовуємо форму

$$\vdash \Box T \frac{\alpha \neg \Box \Phi, \beta_1 \neg \Phi, \dots, \beta_n \neg \Phi, \beta_1 \neg \Box \Phi, \dots, \beta_n \neg \Box \Phi, \Sigma // M}{\alpha \neg \Box \Phi, \Sigma // M}$$

Специфіковані $\beta_1 \neg \Phi, \dots, \beta_n \neg \Phi$ пишемо для всіх наявних $\beta_1, \dots, \beta_n$ таких, що $\alpha \triangleright \beta_1, \dots, \alpha \triangleright \beta_n$. Через транзитивність $\triangleright$ тут необхідні $\beta_1 \neg \Box \Phi, \dots, \beta_n \neg \Box \Phi$.

Якщо для стану α в момент застосування до $\alpha \neg \Box \Phi$ форми елімінації немає γ таких, що $\alpha \triangleright \gamma$, то застосовуємо форму (тут β – новий стан):

$$\vdash \Box fT \frac{\alpha \neg \Box \Phi, \beta \neg \Phi, \beta \neg \Box \Phi, \Sigma // M \cup \{\alpha \triangleright \beta\}}{\alpha \neg \Box \Phi, \Sigma // M}.$$

Форма, яка застосовується до $\alpha \neg \Box \Phi$, – це $\neg \Box$.

6. $\triangleright$ транзитивне й рефлексивне. Отримуємо CGT_RT-числення.

Якщо для стану α в момент застосування до $\alpha \vdash \Box\Phi$ форми елімінації маємо стани $\beta_1, \dots, \beta_n$ такі, що $\alpha \triangleright \beta_1, \dots, \alpha \triangleright \beta_n$, то застосовуємо форму

$$\vdash \Box TR \frac{\alpha \vdash \Box\Phi, \alpha \vdash \Phi, \beta_1 \vdash \Phi, \dots, \beta_n \vdash \Phi, \beta_1 \vdash \Box\Phi, \dots, \beta_n \vdash \Box\Phi, \Sigma // M}{\alpha \vdash \Box\Phi, \Sigma // M}$$

Якщо в момент застосування форми до $\alpha \vdash \Box\Phi$ для α немає відмінних від α станів, досяжних із α (тут завжди маємо $\alpha \triangleright \alpha$), то застосовуємо $\vdash \Box fR$.

Форма, яка застосовується до $\alpha \vdash \Box\Phi$, – це $\vdash \Box$.

7. $\triangleright$ *транзитивне й симетричне*. Отримуємо CGT_TS-числення.

Якщо в момент застосування форми до $\alpha \vdash \Box\Phi$ маємо стани $\beta_1, \dots, \beta_n$ такі, що $\alpha \triangleright \beta_1, \dots, \alpha \triangleright \beta_n$ та $\beta_1 \triangleright \alpha, \dots, \beta_n \triangleright \alpha$, то застосовуємо форму $\vdash \Box T$.

Якщо для стану α в момент застосування до $\alpha \vdash \Box\Phi$ форми елімінації немає γ таких, що $\alpha \triangleright \gamma$, то застосовуємо форму (тут β – новий стан):

$$\vdash \Box fTS \frac{\alpha \vdash \Box\Phi, \beta \vdash \Phi, \beta \vdash \Box\Phi, \Sigma // M \cup \{\alpha \triangleright \beta, \beta \triangleright \alpha\}}{\alpha \vdash \Box\Phi, \Sigma // M}$$

Форма, яка застосовується до $\alpha \vdash \Box\Phi$, – це $\vdash \Box S$.

8. $\triangleright$ *транзитивне, рефлексивне й симетричне*. Отримуємо CGT_RTS-числення.

Якщо в момент застосування форми до $\alpha \vdash \Box\Phi$ маємо стани $\beta_1, \dots, \beta_n$ такі, що $\alpha \triangleright \beta_1, \dots, \alpha \triangleright \beta_n$ та $\beta_1 \triangleright \alpha, \dots, \beta_n \triangleright \alpha$, то застосовуємо форму $\vdash \Box TR$.

Нехай в момент застосування форми до $\alpha \vdash \Box\Phi$ немає відмінних від α станів, досяжних із α .

Список використаних джерел

1. Cocchiarella N.B. Modal logic / N.B. Cocchiarella, M.A. Freund. – Oxford University Press, 2008. – 267 p
2. Нікітченко М.С. Прикладна логіка / М.С. Нікітченко, С.С. Шкільняк. – Київ: ВПЦ Київський університет, 2013. – 278 с.
3. Шкільняк О.С. Транзиційні модальні логіки немонотонних квазіарних предикатів / О.С. Шкільняк // Комп'ютерна математика. – 2014. – Вип. 2. – С. 99–110.
4. Шкільняк О.С. Семантичні аспекти модальних логік часткових немонотонних предикатів / О.С. Шкільняк // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. – Серія: фіз.-мат. науки. – 2014. – Вип. 4. – С. 238–241.
5. Шкільняк С.С. Спектр секвенційних числень першопорядкових композиційно-номінативних логік / С.С. Шкільняк // Проблеми програмування. – 2013. – № 3. – С. 22–37.

Тоді до $\alpha \vdash \Box\Phi$ застосовуємо $\vdash \Box fR$.

Форма, яка застосовується до $\alpha \vdash \Box\Phi$, – це $\vdash \Box S$.

Основну властивість секвенційних форм дає

Теорема 2. Нехай $\frac{\vdash \Lambda \vdash K // M \quad \vdash X \vdash Z // M}{\vdash \Gamma \vdash \Delta // M}$ та

$\frac{\vdash \Lambda \vdash K // M}{\vdash \Gamma \vdash \Delta // M}$ – базові секвенційні форми. Тоді:

- 1) $\Lambda \models K$ та $X \models Z \Rightarrow \Gamma \models \Delta$; $\Gamma \not\models \Delta \Rightarrow \Lambda \not\models K$ або $X \not\models Z$;
- 2) $\Lambda \models K \Rightarrow \Gamma \models \Delta$; $\Gamma \not\models \Delta \Rightarrow \Lambda \not\models K$.

Висновки

Досліджено новий клас програмно-орієнтованих логічних формалізмів – транзиційні модальні логіки часткових квазіарних предикатів, не обмежених умовою монотонності (еквітонності). Описано семантичні властивості чистих першопорядкових ТМЛ, досліджено властивості відношення логічного наслідку для множин специфікованих станами формул. На цій основі для ТМЛ немонотонних предикатів запропоновано числення секвенційного типу. Вказано умови замкненості секвенцій, описано різновиди таких числень та наведено відповідні секвенційні форми.

Побудова виведення (секвенційного дерева) для пропонованих числень ТМЛ та доведення для цих числень теорем коректності й повноти буде описано в наступних роботах.

References

1. COCCHIARELLA, N. and FREUND, M. (2008). *Modal logic*. Oxford University Press.
2. NIKITCHENKO, M. and SHKILNIAK, S. (2013). *Applied logic*. Kyiv: VPC Kyivskyi Universytet.
3. SHKILNIAK, O. (2014). Transitional modal logics of non-monotone quasiary predicates. In *Computer mathematics*. 2, p. 99–110.
3. SHKILNIAK, O. (2014). Semantic aspects of modal logics of partial non-monotone predicates. In *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics & Mathematics*. No 4. P. 238–241.
5. SHKILNIAK, S. (2013). Spectrum of sequent calculi of first-order composition-nominative logics. In *Problems in programming*. № 3, p. 22–37.

Надійшла до редколегії 23.09.2015

УДК 004.42:510.69

Шкільняк С. С., д. ф.-м. н., проф.,
Волковицький Д. Б., аспірант.

Безкванторно-функціональні логіки часткових квазіарних предикатів

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т
Глушкова, 4д,
e-mail: ttp@unicyb.kiev.ua

S.S. Shkilniak, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof.,
D.B. Volkovytskyi, Postgraduate Student

Free-quantifier functional logics of partial quasi-ary predicates

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: ttp@unicyb.kiev.ua

Досліджено безкванторно-функціональні логіки часткових квазіарних предикатів. Описано семантичні моделі та мови таких логік, досліджено їх семантичні властивості. Розглянуто нормальні форми термів та формул, запропоновано кодування нормальних термів. Введено поняття S-субтавтології, показано збіжність класів S-субтавтологій та неспростовних формул. Доведено розв'язність проблем виконуваності та неспростовності формул мови безкванторно-функціональної логіки. Ключові слова: логіка, предикат, суперпозиція, формула, терм.

In this paper we study new classes of program-oriented logical formalisms – logics of partial quasi-ary predicates of free-quantifier level. This logics occupy intermediate position between propositional logic and first-order composition-nominative logics. We consider three classes of this logics: free-quantifier functional logics, free-quantifier functional logics with composition of weak equality = and free-quantifier functional logics with composition of strong equality $\equiv$. The focus of the paper is devoted to research of free-quantifier functional logics. Properties of the composition superposition are described. We define semantic models and languages of the introduced logics and consider their semantic properties. We consider normal forms of terms and formulas, we introduced the concept of S-subtautology. Coding of normal terms are proposed. Using this coding we build the refutable interpretation for each formula that is not S-subtautology. It is proved on this basis that the class of S-subtautology is matched with the class of irrefutable formulas. It consequently we received the solvability of problems of irrefutability and of satisfiability of the formulas of free-quantifier functional logics.

Key words: logic, predicate, superposition, formula, term.

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Буй Д.Б.

Розвиток інформаційних технологій і програмування зумовлює розширення сфери застосування математичної логіки. Розроблено низку різноманітних логічних систем, які з великим успіхом використовуються для розв'язання різноманітних задач інформатики й програмування. В основі таких систем зазвичай лежить класична логіка предикатів. Водночас класична логіка має (див. [1, 2]) низку обмежень. Тому набуває актуальності проблема побудови логічних формалізмів, орієнтованих на потреби програмування. Побудову програмно-орієнтованих логічних формалізмів доцільно проводити на базі спільного для логіки й програмування композиційно-номінативного підходу. Логіки, збудовані на його основі, названо композиційно-номінативними (КНЛ).

Метою даної роботи є дослідження нових класів КНЛ – безкванторних логік квазіарних предикатів. В таких логіках, що засвідчує їх назва, не використовуються композиції квантифікації, характерні для першопорядкових логік. Безкванторні логіки займають проміжне становище між пропозиційною та першопорядковими логіками.

На безкванторному рівні виділимо підрівні:

- реномінативний (РНЛ);
- реномінативний з слабкою рівністю (РНЛР);
- реномінативний з строгою рівністю (РНЛРС);
- безкванторно-функціональний (БКФЛ);
- безкванторно-функціональний з слабкою рівністю (БКФЛР);
- безкванторно-функціональний з строгою рівністю (БКФЛРС).

Найабстрактнішим з цих підрівнів є реномінативний. Реномінативні логіки добре досліджені (див., напр., [1, 2]), започатковано [3] вивчення реномінативних логік з рівністю. В даній роботі основна увага приділена вивченню безкванторних логік функціонального рівня (БКФЛ).

Поняття, які в роботі не визначаються, тлумачимо в сенсі [1, 2].

1. Основні поняття і визначення

На безкванторно-функціональних рівнях функції та предикати – квазіарні, вони задаються на іменних множинах.

V - A -іменна множина (V - A -ІМ) – це однозначна функція вигляду $d: V \rightarrow A$.

Множину всіх V - A -ІМ будемо позначати ${}^V A$.

Функцію $asn: {}^V A \rightarrow 2^V$ вводимо так:

$$asn(d) = \{v \in V \mid v \mapsto a \in d \text{ для деякого } a \in A\}.$$

Операцію $\|_{-X}$ видалення компонент з іменами із множини $X \subseteq V$ задаємо так:

$$d \|_{-X} = \{v \mapsto a \in d \mid v \notin X\}.$$

Замість $d \|_{-\{v_1, \dots, v_n\}}$ та $d \|_{-\{x\}}$ будемо також скорочено писати $d \|_{-v_1, \dots, v_n}$ та $d \|_{-x}$.

Задамо операцію ∇ накладки ІМ d_2 на ІМ d_1 :

$$d_1 \nabla d_2 = d_1 \|_{-asn(d_2)} \cup d_2.$$

Параметричну операцію реномінації (перейменування) $r_{x_1, \dots, x_n}^{v_1, \dots, v_n}: {}^V A \rightarrow {}^V A$ задаємо так:

$$r_{x_1, \dots, x_n}^{v_1, \dots, v_n}(d) = d \nabla [v_1 \mapsto d(x_1), \dots, v_n \mapsto d(x_n)].$$

Введемо для $u_1, \dots, u_n$ скорочене позначення $\bar{u}$.

Тоді замість $r_{x_1, \dots, x_n}^{v_1, \dots, v_n}$ також пишемо $r_{\bar{x}}^{\bar{v}}$.

Виділимо наступні класи квазіарних функцій.

Функції вигляду ${}^V A \rightarrow A$ назвемо V - A -квазіарними функціями.

Клас таких функцій позначимо Fn^A .

Функції вигляду ${}^V A \rightarrow \{T, F\}$ назвемо V - A -квазіарними предикатами.

Клас таких предикатів позначимо Pr^A .

Тут $\{T, F\}$ – множина істиннісних значень.

В цій роботі вважаємо, що функції й предикати – часткові однозначні.

Для однозначних квазіарних функцій та предикатів будемо писати:

$g(d) \downarrow$, якщо значення $g(d)$ визначене;

$g(d) \uparrow$, якщо $g(d)$ невизначене.

Область істинності та область хибності V - A -квазіарного предиката P – це множини

$$T(P) = \{d \in {}^V A \mid P(d) = T\};$$

$$F(P) = \{d \in {}^V A \mid P(d) = F\}.$$

Предикат $P: {}^V A \rightarrow \{T, F\}$ назвемо:

– неспростовним (частково істинним), якщо $F(P) = \emptyset$;

– виконуваним, якщо $T(P) \neq \emptyset$.

Предметне ім'я $x \in V$ (строго) неістотне для квазіарної функції (предиката) g , якщо

$$d_1 \|_{-x} = d_2 \|_{-x} \Rightarrow g(d_1) = g(d_2)$$

Квазіарна функція (предикат) g еквітонна, якщо $g(d_1) \downarrow$ та $d_1 \subseteq d_2 \Rightarrow g(d_2) \downarrow = g(d_1)$.

2. Рівні безкванторних логік

Рівень РНЛ. Тут можна перейменовувати компоненти вхідних даних. Це дає змогу ввести композицію реномінації. Базові композиції РНЛ: логічні зв'язки $\neg, \vee$ та реномінація $R_{\bar{x}}^{\bar{v}}$.

Дамо визначення цих композицій через області істинності й хибності відповідних предикатів:

$$T(\neg P) = F(P);$$

$$F(\neg P) = T(P);$$

$$T(P \vee Q) = T(P) \cup T(Q);$$

$$F(P \vee Q) = F(P) \cap F(Q);$$

$$T(R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(P)) = \{d \in {}^V A \mid r_{\bar{x}}^{\bar{v}}(d) \in T(P)\};$$

$$F(R_{\bar{x}}^{\bar{v}}(P)) = \{d \in {}^V A \mid r_{\bar{x}}^{\bar{v}}(d) \in F(P)\}.$$

На рівнях РНЛР та РНЛРС додатково можна отожднювати й розрізняти значення предметних імен за допомогою спеціальних 0-арних композицій – параметризованих за іменами предикатів рівності. Можна розглядати дві різновидності цих предикатів: слабкої (з точністю до визначеності) рівності $=_{xy}$ та строгої (точної) рівності $\equiv_{xy}$. Звідси отримуємо відповідні рівні реномінативних логік з рівністю.

Рівень РНЛР. Базові композиції:

$$\neg, \vee, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}, =_{xy}.$$

Рівень РНЛРС. Базові композиції:

$$\neg, \vee, R_{\bar{x}}^{\bar{v}}, \equiv_{xy}.$$

Предикати $\equiv_{xy}$ та $=_{xy}$ задаються їх областями істинності й хибності наступним чином:

$$T(\equiv_{xy}) = \{d \in {}^V A \mid d(x) \downarrow, d(y) \downarrow \text{ та } d(x) = d(y)\} \cup \{d \in {}^V A \mid d(x) \uparrow \text{ та } d(y) \uparrow\},$$

$$F(\equiv_{xy}) = \{d \in {}^V A \mid d(x) \downarrow, d(y) \downarrow \text{ та } d(x) \neq d(y)\} \cup \{d \in {}^V A \mid d(x) \downarrow, d(y) \uparrow \text{ або } d(x) \uparrow, d(y) \downarrow\};$$

$$T(=_{xy}) = \{d \in {}^V A \mid d(x) \downarrow, d(y) \downarrow \text{ та } d(x) = d(y)\},$$

$$F(=_{xy}) = \{d \in {}^V A \mid d(x) \downarrow, d(y) \downarrow \text{ та } d(x) \neq d(y)\}.$$

На функціональних рівнях можна формувати нові базові значення для вхідних даних. Це дає змогу ввести композицію суперпозиції.

Нехай F^A – клас квазіарних функцій вигляду $f: {}^V A \rightarrow R$.

Параметрична композиція суперпозицій $S^{v_1, \dots, v_n} : F^A \times (Fn^A)^n \rightarrow F^A$ функціям $f, g_1, \dots, g_n$ зставляє функцію $S^{v_1, \dots, v_n}(f, g_1, \dots, g_n)$, значення якої для кожного $d \in {}^V A$ обчислюється так:

$$S^{v_1, \dots, v_n}(f, g_1, \dots, g_n)(d) = f(d \nabla [v_1 \mapsto g_1(d), \dots, v_n \mapsto g_n(d)]).$$

Виділення V - A -квазіарних функцій та V - A -квазіарних предикатів індукує виділення суперпозицій двох типів:

- суперпозиції вигляду $(Fn^A)^{n+1} \rightarrow Fn^A$ функцій у функції (результатом є функція);
- суперпозиції вигляду $Pr^A \times (Fn^A)^n \rightarrow Pr^A$ функцій у предикати (результатом є предикат).

Для роботи з окремими компонентами даних введемо спеціальні 0-арні композиції – функції деномінації (розіменування) $'v$, де $v \in V$.

Ці функції задаємо так: $'v(d) = d(v)$.

При наявності функцій деномінації композиції реномінації можна промодельовувати за допомогою композицій суперпозицій.

Справді, для кожної $f \in Fn^A \cup Pr^A$ маємо

$$R_{v_1, \dots, v_n}^{u_1, \dots, u_n}(f) = S^{u_1, \dots, u_n}(f, 'v_1, \dots, 'v_n).$$

Композиції $\equiv$ та $\equiv$ задаються так.

Для кожних $f, g \in Fn^A$ та $d \in {}^V A$

$$(f, g)(d) = \begin{cases} T, & \text{якщо } f(d) \downarrow, g(d) \downarrow, f(d) = g(d), \\ F, & \text{якщо } f(d) \downarrow, g(d) \downarrow, f(d) \neq g(d), \\ \text{невизначене,} & \text{якщо } f(d) \uparrow \text{ або } g(d) \uparrow; \end{cases}$$

$$\equiv(f, g)(d) = \begin{cases} T, & \text{якщо } f(d) \downarrow, g(d) \downarrow, f(d) = g(d) \\ & \text{або } f(d) \uparrow, g(d) \uparrow; \\ F, & \text{якщо } f(d) \downarrow, g(d) \downarrow, f(d) \neq g(d) \\ & \text{або } f(d) \downarrow, g(d) \uparrow \\ & \text{або } f(d) \uparrow, g(d) \downarrow. \end{cases}$$

Таким чином, отримуємо наступні рівні безкванторно-функціональних логік.

Рівень БКФЛ. Базові композиції:

$$\neg, \vee, S^{\bar{x}}, 'v.$$

Рівень БКФЛР. Базові композиції:

$$\neg, \vee, S^{\bar{x}}, 'v, \equiv.$$

Рівень БКФЛРС. Базові композиції:

$$\neg, \vee, S^{\bar{x}}, 'v, \equiv.$$

3. Властивості композицій суперпозицій та рівності

Теорема 1. Композиції $S^{\bar{v}}$ та $\equiv$ зберігають еквітонність V - A -квазіарних функцій і предикатів.

Доведення. Нехай $f, g_1, \dots, g_n$ еквітонні, $d, d' \in {}^V A$, $d' \supseteq d$. Нехай $S^{v_1, \dots, v_n}(f, g_1, \dots, g_n)(d) \downarrow$, тобто маємо $S^{v_1, \dots, v_n}(f, g_1, \dots, g_n)(d) = f(d \nabla [v_1 \mapsto g_1(d), \dots, v_n \mapsto g_n(d)]) \downarrow$.

За еквітонністю $g_1, \dots, g_n$ та з умови $d' \supseteq d$ для всіх $i \in \{1, \dots, n\}$ маємо: якщо $g_i(d) \downarrow$, то $g_i(d') \downarrow = g_i(d)$.

Звідси отримуємо $d' \nabla [v_1 \mapsto g_1(d'), \dots, v_n \mapsto g_n(d')] \supseteq d \nabla [v_1 \mapsto g_1(d), \dots, v_n \mapsto g_n(d)]$. За еквітонністю f

тоді отримуємо $f(d' \nabla [v_1 \mapsto g_1(d'), \dots, v_n \mapsto g_n(d')]) \downarrow = f(d \nabla [v_1 \mapsto g_1(d), \dots, v_n \mapsto g_n(d)])$, тобто

$$S^{v_1, \dots, v_n}(f, g_1, \dots, g_n)(d') \downarrow = S^{v_1, \dots, v_n}(f, g_1, \dots, g_n)(d).$$

Доводимо для $\equiv$. Нехай f, g еквітонні, $d, d' \in {}^V A$, $d' \supseteq d$. Нехай $\equiv(f, g)(d) \downarrow$. Тоді $\equiv(f, g)(d) = T$ або $\equiv(f, g)(d) = F$. В першому випадку $f(d) \downarrow = g(d) \downarrow$, в другому випадку $f(d) \downarrow \neq g(d) \downarrow$. За еквітонністю f та g маємо $f(d') \downarrow = f(d) \downarrow$ та $g(d') \downarrow = g(d) \downarrow$. В першому випадку $f(d') \downarrow = g(d') \downarrow$, звідки $\equiv(f, g)(d') = T$, в другому випадку $f(d') \downarrow \neq g(d') \downarrow$, звідки маємо $\equiv(f, g)(d') = F$. Отже, $\equiv(f, g)(d') \downarrow = \equiv(f, g)(d) \downarrow$.

Твердження 1. Композиція $\equiv$ еквітонність не зберігає.

Нехай f, g еквітонні, $d' \supseteq d$, $f(d) \uparrow$, $g(d) \uparrow$ та $f(d) \downarrow \neq g(d) \downarrow$. Тоді $\equiv(f, g)(d) = T$ та $\equiv(f, g)(d') = F$.

Таким чином, на рівні БКФЛРС логіки еквітонних предикатів не розглядаємо.

Розглянемо основні властивості композицій суперпозицій.

S $\neg$) Дистрибутивність суперпозиції щодо $\neg$:

$$S^{\bar{v}}(\neg P, \bar{f}) = \neg S^{\bar{v}}(P, \bar{f}).$$

S $\vee$) Дистрибутивність суперпозиції щодо $\vee$:

$$S^{\bar{v}}(P \vee Q, \bar{f}) = S^{\bar{v}}(P, \bar{f}) \vee S^{\bar{v}}(Q, \bar{f}).$$

SS) Згортка суперпозицій: (тут $\varphi \in Fn^A \cup Pr^A$, введені позначення $\bar{u}, \bar{t}, \bar{x}, \bar{r}, \bar{w}, \bar{v}, \bar{s}$ для $u_1, \dots, u_n; t_1, \dots, t_n; x_1, \dots, x_k; r_1, \dots, r_k; w_1, \dots, w_k; v_1, \dots, v_m; s_1, \dots, s_m$):

$$S^{\bar{u}, \bar{x}}(S^{\bar{v}, \bar{v}}(\varphi, \bar{r}, \bar{s}), \bar{t}, \bar{w}) = S^{\bar{u}, \bar{x}, \bar{v}}(\varphi, \bar{t}, S^{\bar{u}, \bar{x}}(r_1, \bar{t}, \bar{w}), \dots, S^{\bar{u}, \bar{x}}(r_k, \bar{t}, \bar{w}), S^{\bar{u}, \bar{x}}(s_1, \bar{t}, \bar{w}), \dots, S^{\bar{u}, \bar{x}}(s_m, \bar{t}, \bar{w})).$$

CN) Згортка імен (тут $\varphi \in Fn^A \cup Pr^A$):

$$S^{x_1, \dots, x_m, v_1, \dots, v_n}(\varphi, 'x_1, \dots, 'x_m, g_1, \dots, g_n) = S^{v_1, \dots, v_n}(\varphi, g_1, \dots, g_n).$$

Зокрема, маємо $S^{x_1, \dots, x_m}(\varphi, 'x_1, \dots, 'x_m) = \varphi$.

SDD) Згортка неістотних імен для функцій 'x:

$$S^{v_1, \dots, v_n}('x, g_1, \dots, g_n) = 'x \text{ за умови } x \notin \{\bar{v}\}.$$

SDF) Спрощення для функцій 'x:

$$S^{x, v_1, \dots, v_n}('x, f, g_1, \dots, g_n) = f.$$

Зокрема, $S^x('x, f) = f$.

CU) Згортка за неістотним іменем (тут маємо $\varphi \in Fn^A \cup Pr^A$, x неістотне для φ):

$$S^{x, v_1, \dots, v_n}(\varphi, f, g_1, \dots, g_n) = S^{v_1, \dots, v_n}(\varphi, g_1, \dots, g_n).$$

Зокрема, $S^x(\varphi, f) = \varphi$, якщо x неістотне для φ .

Зауважимо, що властивості SS, CN, CU формуються для квазіарних функцій та предикатів, а властивості SDD, SDF – лише для квазіарних функцій.

4. Мови та семантичні моделі БКФЛ

Семантичними моделями БКФЛ є композиційні системи V -квазіарних функцій і предикатів. Це трійки вигляду $CS = (A, Fn^A \cup Pr^A, C)$, де Fn^A та Pr^A – множини V - A -квазіарних функцій та V - A -квазіарних предикатів, C – множина композицій над $Fn^A \cup Pr^A$, яка задається базовими композиціями $\neg, \vee, S^{\bar{v}}, 'v$.

Композиційна система $(A, Fn^A \cup Pr^A, C)$ визнає композиційну алгебру V - A -квазіарних функцій і предикатів $(Fn^A \cup Pr^A, C)$ та алгебру (алгебраїчну систему) даних $(A, Fn^A \cup Pr^A)$.

Надалі будемо розглядати БКФЛ, розширені шляхом виділення підмножини $U \subseteq V$ тотально неістотних предметних імен, тобто імен, неістотних для всіх базових функцій та предикатів. Будемо вважати, що така U розв'язна відносно V .

Побудова композиційної алгебри дає змогу визначити мову БКФЛ. Алфавіт мови:

- множини предметних імен (змінних) V та тотально неістотних предметних імен $U \subseteq V$;
- множина $Dns = \{v | v \in V\}$ деномінаційних символів (ДНС), тобто імен функцій розіменування;
- множини Fns та Ps функціональних (ФНС) та предикатних символів (ПС);
- множина $\{\neg, \vee, S^{\bar{v}}, 'v\}$ символів базових композицій.

Множину $\sigma = Fns \cup Ps$ назвемо сигнатурою мови БКФЛ.

При зафіксованій множині базових композицій мови БКФЛ істотно відрізняються множинами Fns та Ps (сигнатурою). Неістотні відмінності мов – це способи запису термів і формул мови. При визначенні термів і формул будемо використовувати префіксну (польську) форму запису.

Множини термів Tr і формул Fr вводимо так.

T0. Кожний ФНС та кожний ДНС є термом, такі терми – атомарні.

T1. Нехай $\tau, t_1, \dots, t_n \in Tr$; тоді $S^{v_1, \dots, v_n} \tau t_1 \dots t_n \in Tr$.

Ф0. Кожний ПС є формулою (атомарною).

Ф1. Нехай $\Phi, \Psi \in Fr, t_1, \dots, t_n \in Tr$; тоді

$$S^{v_1, \dots, v_n} \Phi t_1 \dots t_n \in Fr, \neg \Phi \in Fr, \vee \Phi \Psi \in Fr.$$

Для бінарних композицій звичніше використовувати не префіксну, а інфіксну форму, коли символ композиції записується між аргументами.

Надалі використовуємо також інфіксну форму та допоміжні символи – коми й дужки "(" і ")".

Використовуємо також символи похідних композицій $\&, \rightarrow$. Наприклад, формули $\vee \Phi \Psi, \vee \neg \Phi \Psi, \neg \vee \neg \Phi \neg \Psi$ будемо позначати $\Phi \vee \Psi, \Phi \rightarrow \Psi, \Phi \& \Psi$. Подібні записи термів та формул будемо також називати термами та формулами.

Позначаємо $fs(\phi)$ множину всіх тих ФНС, які входять до складу терма ϕ .

Позначимо $nm(\phi)$ множину всіх $v \in V$, які фігурують у символах суперпозиції, що входять до складу терма чи формули ϕ .

Позначимо $dnm(\phi)$ множину всіх імен, які відповідні деномінаційним символам, що входять до складу терма чи формули ϕ .

Множину $nm(\phi) \cup dnm(\phi)$ позначимо $ndn(\phi)$ і назвемо *множиною імен* терма чи формули ϕ .

Інтерпретуємо мови БКФЛ на композиційних системах квазіарних функцій та предикатів.

Символи Fns та Ps позначають (виділяють) базові функції та базові предикати в множинах Fn^A та Pr^A , зокрема, символи $'v$ позначають відповідні функції деномінації $'v$. Для опису такого позначення задаємо тотальне однозначне відображення $I: Dns \cup Fns \cup Ps \rightarrow Fn^A \cup Pr^A$. При цьому $I('v) = 'v$ для кожного $'v \in Dns$, кожне $z \in U$ неістотне для кожного $g \in I(Fns \cup Ps)$.

Далі продовжимо I до відображення інтерпретації $I: Tr \cup Fr \rightarrow Fn^A \cup Pr^A$ згідно побудови термів та формул із простіших за допомогою символів композицій:

$$IT) I(S^{v_1, \dots, v_n} \tau t_1 \dots t_n) = S^{v_1, \dots, v_n} (I(\tau), I(t_1), \dots, I(t_n));$$

$$IF) I(S^{v_1, \dots, v_n} \Phi t_1 \dots t_n) = S^{v_1, \dots, v_n} (I(\Phi), I(t_1), \dots, I(t_n));$$

$$I(\neg \Phi) = \neg(I(\Phi)), I(\vee \Phi \Psi) = \vee(I(\Phi), I(\Psi)).$$

Трійку $J = (CS, \sigma, I)$ назвемо *інтерпретацією* мови БКФЛ сигнатури σ .

Скорочено інтерпретації мови також позначаємо як (A, σ, I) чи (A, I) .

Предикат $I(\Phi)$, який є значенням формули Φ при інтерпретації J , позначаємо Φ_J .

Функцію $I(t)$, яка є значенням терма t при інтерпретації J , позначаємо t_J .

Ім'я $x \in V$ неістотне для терма t , якщо при кожній інтерпретації J ім'я x неістотне для функції t_J .

Ім'я $x \in V$ неістотне для формули Φ , якщо при кожній інтерпретації J ім'я x неістотне для предиката Φ_J .

Формула Φ неспростовна (частково істинна) при інтерпретації J , що позначаємо $J \models \Phi$, якщо предикат Φ_J – неспростовний.

Формула Φ неспростовна (частково істинна), що позначаємо $\models \Phi$, якщо Φ є неспростовною при кожній інтерпретації J .

Формула Φ виконується при інтерпретації J , якщо предикат Φ_J – виконуваний.

Формула Φ виконується, якщо Φ виконується при деякій інтерпретації J .

Формула Ψ є логічним наслідком формули Φ , що позначаємо $\Phi \models \Psi$, якщо формула $\Phi \rightarrow \Psi$ неспростовна. Це означає: при кожній інтерпретації J маємо $T(\Phi_J) \cap F(\Phi_J) = \emptyset$.

Формули Φ та Ψ логічно еквівалентні, що позначаємо $\Phi \sim \Psi$, якщо $\Phi \models \Psi$ та $\Psi \models \Phi$.

Формули Φ та Ψ логічно строго еквівалентні, що позначаємо $\Phi \sim_{TF} \Psi$, якщо при кожній інтерпретації J маємо $T(\Phi_J) = T(\Psi_J)$ та $F(\Phi_J) = F(\Psi_J)$, тобто предикати Φ_J та Ψ_J цілком збігаються.

5. Семантичні властивості БКФЛ

Виділення підмножини $U \subseteq V$ тотально неістотних предметних імен дає змогу визначити для кожного терма чи формули g множину $v(g)$ імен, які гарантовано неістотні.

Для кожного $g \in Fns \cup Ps$ маємо $v(g) = U$.

Для кожного $'x \in Dns$ задамо $v('x) = V \setminus \{x\}$.

Далі визначаємо:

$$v(S^{x_1, \dots, x_n} \tau_1 \dots \tau_n) = (v(\tau) \cup \{x_1, \dots, x_n\}) \cap \bigcap_{\{i | v_i \notin v(\tau)\}} v(t_i);$$

$$v(\neg \Phi) = v(\Phi);$$

$$v(\vee \Phi \Psi) = v(\Phi) \cup v(\Psi);$$

$$v(S^{x_1, \dots, x_n} \Phi \tau_1 \dots \tau_n) = (v(\Phi) \cup \{x_1, \dots, x_n\}) \cap \bigcap_{\{i | v_i \notin v(\Phi)\}} v(t_i).$$

Теорема 2. $x \in v(\tau) \Rightarrow x$ неістотне для терма τ ;
 $x \in v(\Phi) \Rightarrow x$ неістотне для формули Φ .

Доведення теореми проводиться індукцією за побудовою формули.

Семантичні властивості формул БКФЛ індуктовані відповідними властивостями композицій та записуються аналогічно. При цьому замість рівності предикатів фігурує строга еквівалентність формул, які позначають ці предикати.

Властивості дистрибутивності суперпозиції та логічних зв'язок:

$$S \neg) S^{\bar{v}}(\neg \Phi, \bar{t}) \sim_{TF} \neg S^{\bar{v}}(\Phi, \bar{t});$$

$$S \vee) S^{\bar{v}}(\Phi \vee \Psi, \bar{t}) \sim_{TF} S^{\bar{v}}(\Phi, \bar{t}) \vee S^{\bar{v}}(\Psi, \bar{t}).$$

Властивості SS, CN, CU формулюються для функцій та предикатів. Для формул вони індукують наступні властивості.

SSФ) Згортка суперпозицій для формул:

$$S^{\bar{u}, \bar{x}}(S^{\bar{x}, \bar{v}}(\varphi, \bar{r}, \bar{s}), \bar{t}, \bar{w}) \sim_{TF} S^{\bar{u}, \bar{x}, \bar{v}}(\varphi, \bar{t}, S^{\bar{x}, \bar{v}}(r_1, \bar{t}, \bar{w}), \dots, S^{\bar{x}, \bar{v}}(r_k, \bar{t}, \bar{w}), S^{\bar{x}, \bar{v}}(s_1, \bar{t}, \bar{w}), \dots, S^{\bar{x}, \bar{v}}(s_m, \bar{t}, \bar{w})).$$

Тут позначення: $\bar{u}$ для $u_1, \dots, u_n$; $\bar{t}$ для $t_1, \dots, t_n$;
 $\bar{x}$ для $x_1, \dots, x_k$; $\bar{r}$ для $r_1, \dots, r_k$; $\bar{w}$ для $w_1, \dots, w_k$;
 $\bar{v}$ для $v_1, \dots, v_m$; $\bar{s}$ для $s_1, \dots, s_m$.

CNФ) Згортка імен для формул:

$$S^{x_1, \dots, x_m, v_1, \dots, v_n}(\Phi, 'x_1, \dots, 'x_m, t_1, \dots, t_n) \sim_{TF} \\ \sim_{TF} S^{v_1, \dots, v_n}(\Phi, t_1, \dots, t_n).$$

Зокрема, $S^{x_1, \dots, x_m}(\Phi, 'x_1, \dots, 'x_m) \sim_{TF} \Phi$.

CUФ) Згортка за неістотним іменем для формул:

$$S^{x, v_1, \dots, v_n}(\Phi, t, t_1, \dots, t_n) \sim_{TF} S^{v_1, \dots, v_n}(\Phi, t_1, \dots, t_n)$$

за умови, що x неістотне для Φ .

Зокрема, якщо x неістотне для Φ , то

$$S^x(\Phi, t) \sim_{TF} \Phi,$$

Властивості SS, CN, CU для функцій та властивості SDD, SDF, які формулюються лише для функцій, індукують для термів відповідні властивості, які подаємо у вигляді наступної теореми (таке громіздке формулювання вимушене відсутністю на рівні БКФЛ композицій рівності).

Теорема 3. Нехай формула Ψ отримана з формули Φ заміною входжень термів:

- 1) $S^{\bar{u}, \bar{x}}(S^{\bar{x}, \bar{v}}(\tau, \bar{r}, \bar{s}), \bar{t}, \bar{w})$ на $S^{\bar{u}, \bar{x}, \bar{v}}(\tau, \bar{t}, S^{\bar{x}, \bar{v}}(r_1, \bar{t}, \bar{w}), \dots, S^{\bar{x}, \bar{v}}(r_k, \bar{t}, \bar{w}), S^{\bar{x}, \bar{v}}(s_1, \bar{t}, \bar{w}), \dots, S^{\bar{x}, \bar{v}}(s_m, \bar{t}, \bar{w}))$;
- 2) $S^{\bar{x}, \bar{v}}(\tau, 'x, \bar{t})$ на $S^{\bar{v}}(\tau, \bar{t})$, $S^{\bar{x}}(\tau, 'x)$ на τ ;
- 3) $S^{\bar{v}}('x, \bar{t})$ на $'x$;
- 4) $S^{x, \bar{v}}('x, t, \bar{t})$ на t ,
- 5) $S^{x, \bar{v}}(\tau, t, \bar{t})$ на $S^{\bar{v}}(\tau, \bar{t})$, де x неістотне для τ .

Тоді $\Phi \sim_{TF} \Psi$.

Тут пп.1, 2, 3, 4, 5 теореми відповідають властивостям SS, CN, SDD, SDF, CU для функцій.

Основою еквівалентних перетворень формул БКФЛ є теорема еквівалентності.

Теорема 4. Нехай Φ' отримано з формули Φ заміною деяких входжень $\Phi_1, \dots, \Phi_n$ на $\Psi_1, \dots, \Psi_n$. Якщо $\Phi_1 \sim_{TF} \Psi_1, \dots, \Phi_n \sim_{TF} \Psi_n$, то $\Phi \sim_{TF} \Phi'$.

Теорема доводиться індукцією за побудовою формули.

6. Нормальні форми

Розглянемо нормальні форми для термів та формул мови БКФЛ.

Терм назовемо *нормальним*, якщо

– в усіх його символах суперпозиції (якщо вони є) згорнуті неістотні імена й виконані спрощення згідно з теоремою 3;

– всі його символи суперпозиції (якщо вони є) застосовані тільки до ФНС.

Формула Ψ знаходиться в *нормальній формі*, або Ψ є *нормальною формулою*, якщо для Ψ виконується умова:

– в усіх її символах суперпозиції (якщо вони є) згорнуті неістотні імена й виконані спрощення згідно з SSФ, ZФ, ZУФ та теоремою 3;

– усі символи суперпозиції формули Ψ (якщо вони є) застосовані тільки до ФНС чи ПС.

Таким чином, формула Φ нормальна, якщо всі її терми нормальні та в усіх її символах суперпозиції згорнуті неістотні імена й виконані спрощення згідно з $Z\Phi$ та $ZU\Phi$.

Формула *елементарна*, якщо вона атомарна або має вигляд $S^{\bar{v}} p \bar{t}$, де $p \in Ps$

Елементарна формула *примітивна*, якщо вона атомарна або має вигляд $S^{\bar{v}} p \bar{t}$, де усі її терми нормальні та $\{\bar{v}\} \cap U = \emptyset$.

Кожна нормальна формула Φ утворена з примітивних формул за допомогою символів пропозиційних композицій. Такі примітивні підформули назвемо P -компонентами формули Φ .

Теорема 5. Для кожної формули Φ можна збудувати нормальну формулу Ψ таку: $\Phi \sim_{TF} \Psi$.

Доведення. Зведення формули Φ до нормальної форми виконуємо так. Використовуючи властивості $S\rightarrow$ та $S\vee$, просуваємо символи суперпозиції вглиб формули. Використовуючи $SS\Phi$ та теорему 5, згортаємо символи суперпозиції. При появі відповідної ситуації виконуємо спрощення згідно з $Z\Phi$, $ZU\Phi$, теоремою 5.

Згідно з теоремою еквівалентності, після виконання кожного з таких перетворень отримуємо формулу ϕ у нормальній формі таку, що $\Phi \sim_{TF} \phi$.

Нормальну формулу Ψ , отриману із Φ так, як описано, назвемо *нормалізантаю* формули Φ .

7. Кодування нормальних термів

Нехай Φ – нормальна формула;

нехай $X = ndn(\Phi)$, $Y = fs(\Phi)$.

Занумеруємо множини X та Y :

$$X = \{v_0, v_1, \dots, v_m\}, Y = \{f_0, f_1, \dots, f_h\}.$$

Символи суперпозиції будемо подавати так:

$$S^{v_{i_1} \dots v_{i_n}}, \text{ де } i_1 < i_2 < \dots < i_n.$$

Нормальні терми будемо подавати так:

$$S^{v_{i_1} \dots v_{i_n}} f_j t_1 \dots t_n, \text{ де } i_1 < i_2 < \dots < i_n.$$

Примітивні формули будемо подавати так:

$$S^{v_{i_1} \dots v_{i_n}} p t_1 \dots t_n, \text{ де } i_1 < i_2 < \dots < i_n.$$

Задамо кодування κ нормальних термів:

$$\kappa(v_i) = 3 \cdot i,$$

$$\kappa(f_i) = 3 \cdot i + 1$$

$$\kappa(S^{v_{i_1} \dots v_{i_n}} f_j t_1 \dots t_n) = 3 \cdot C^3(C^n(C(i_1, b_1),$$

$$C(i_2 - i_1 - 1, b_2), \dots, C(i_n - i_{n-1} - 1, b_n)), j, n - 1) + 2,$$

$$\text{де } b_1 = \kappa(t_1), b_2 = \kappa(t_2), \dots, b_n = \kappa(t_n).$$

Для нормальних термів таке кодування гарантує: $\tau_1 \neq \tau_2 \Rightarrow \kappa(\tau_1) \neq \kappa(\tau_2)$.

З іншого боку, за кожним числом як кодом можна однозначно відновити терм і перевірити його нормальність (в декодованому термі можливі тотожні пари вигляду $S^{v_{i_1} \dots v_{i_n}} f_j \dots v_{i_n}$, але цю ситуацію можна усунути, ускладнивши кодування).

Для кожних інтерпретації $J = (A, I)$ та $d \in {}^VA$ тоді маємо:

$$(S^{v_{i_1} \dots v_{i_n}} f_j t_1 \dots t_n)_J(d) =$$

$$= f_j(d \upharpoonright_{v_{i_1} \dots v_{i_n}} + v_{i_1} \mapsto t_{1J}(d) + \dots + v_{i_n} \mapsto t_{nJ}(d))$$

Задамо інтерпретацію $J = (N, I)$ таким чином.

Візьмемо $d = [v_0 \mapsto 0, v_1 \mapsto 3, \dots, v_m \mapsto 3 \cdot m]$.

Задамо на d значення функцій, які описуються термами формули Φ .

Якщо p – це v_k , то маємо

$$\rho_J(d) = (v_k)_J(d) =$$

$$= (v_k)_J([v_0 \mapsto 0, \dots, v_m \mapsto 3 \cdot m]) = 3 \cdot k = \kappa(v_k).$$

Якщо p – це f_k , то задамо

$$\rho_J(d) = (f_k)_J(d) = 3 \cdot k + 1 = \kappa(f_k)$$

Нехай p – це $S^{v_{i_1} \dots v_{i_n}} f_j t_1 \dots t_n$,

нехай $b_1 = \kappa(t_1)$, $b_2 = \kappa(t_2)$, ..., $b_n = \kappa(t_n)$.

Тоді задамо $\rho_J(d) = (S^{v_{i_1} \dots v_{i_n}} f_j t_1 \dots t_n)_J(d) =$

$$= f_j(d \upharpoonright_{v_{i_1} \dots v_{i_n}} + v_{i_1} \mapsto t_{1J}(d) + \dots + v_{i_n} \mapsto t_{nJ}(d))$$

$$= f_j(d \upharpoonright_{v_{i_1} \dots v_{i_n}} + v_{i_1} \mapsto b_1 + \dots + v_{i_n} \mapsto b_n) = \kappa(p).$$

Умова $\tau_1 \neq \tau_2 \Rightarrow \kappa(\tau_1) \neq \kappa(\tau_2)$ гарантує коректність такого визначення $(f_k)_J(\delta)$ на даних $\delta \in N^X$ зазначеного вище вигляду.

Отже, для кожної терма p формули Φ маємо $\rho_J(d) = \kappa(p)$.

Нехай маємо різні P -компоненти формули Φ із одним і тим же $p \in Ps$: $S^{v_{i_1} \dots v_{i_n}} p t_1 \dots t_n$ та

$S^{v_{i_1} \dots v_{i_k}} p s_1 \dots s_k$. Тоді $\{(v_{i_1}, t_1), \dots, (v_{i_n}, t_n)\}$ та

$\{(v_{i_1}, s_1), \dots, (v_{i_k}, s_k)\}$ різні, звідки маємо:

$$d_1 = d \upharpoonright_{v_{i_1} \dots v_{i_n}} + v_{i_1} \mapsto \kappa(t_1) + \dots + v_{i_n} \mapsto \kappa(t_n) \neq$$

$$\neq d_2 = d \upharpoonright_{v_{i_1} \dots v_{i_k}} + v_{i_1} \mapsto \kappa(s_1) + \dots + v_{i_k} \mapsto \kappa(s_k).$$

Отже, для цих P -компонент маємо на вході p_{kJ} різні дані $d_1 \neq d_2$.

Таким чином, для кожної нормальної формули Φ існують інтерпретація $J = (A, I)$ та $d \in {}^VA$ такі, що для різних P -компонент η та ϕ формули Φ із одним і тим же $p \in Ps$ тоді маємо $\eta_J(d) = p_J(d_1)$, $\phi_J(d_2) = p_J(d_2)$ та $d_1 \neq d_2$.

Отже, для кожної P -компоненти ψ формули Φ значення $\psi_J(d)$ можна задати так, як це потрібно, згідно конкретної істиннісної оцінки.

8. S-субтавтології та неспростовні формули

Формула *пропозиційно нерозкладна*, якщо вона атомарна або має вигляд $S^{\bar{\nu}}\Phi\bar{t}$.

Множину таких формул позначимо Fr_0 .

Істиннісна оцінка мови – це довільне тотальне відображення $\tau: Fr_0 \rightarrow \{T, F\}$. Таке відображення продовжуємо до $\tau: Fr \rightarrow \{T, F\}$:

$$\tau(\Phi) = T \Rightarrow \tau(\neg\Phi) = F,$$

$$\tau(\Phi) = F \Rightarrow \tau(\neg\Phi) = T;$$

$$\tau(\Phi) = T \text{ або } \tau(\Psi) = T \Rightarrow \tau(\vee\Phi\Psi) = T,$$

$$\tau(\Phi) = \tau(\Psi) = F \Rightarrow \tau(\vee\Phi\Psi) = F.$$

Формула Φ *тавтологія*, якщо $\tau(\Phi) = T$ для кожної істиннісної оцінки τ .

Формулу Φ мови БКФЛ назовемо *S-субтавтологією*, якщо її нормалізанта – тавтологія.

Теорема 6. Формула Φ – S-субтавтологія $\Leftrightarrow \Phi$ неспростовна.

Доведення. Нехай Φ – S-субтавтологія, Ψ – нормалізанта формули Φ . Тоді Ψ є тавтологія, звідки Ψ неспростовна. Згідно $\Phi \sim_{TF} \Psi$ формула Φ теж неспростовна.

Нехай тепер Φ неспростовна. Покажемо, що Φ – S-субтавтологія. Припустимо супротивне: нормалізанта Ψ формули Φ – не тавтологія. Якщо Ψ – не тавтологія, то існує істиннісна оцінка мови τ така, що $\tau(\Psi) = F$. Нехай $X = ndn(\Psi)$.

Задамо інтерпретацію $J = (N, I)$ і $d \in N^X$ так, як описано вище. Тоді для різних P -компонент η та ϕ формули Ψ із одним і тим же $p \in Ps$ маємо $\eta_J(d) = p_J(d_1)$, $\phi_J(d_2) = p_J(d_2)$ та $d_1 \neq d_2$. Тепер для кожної P -компоненти ψ формули Ψ значення $\psi_J(d)$ задаємо так: $\psi_J(d) = \tau(\psi)$. Звідси отримуємо $\Psi_J(d) = \tau(\Psi) = F$, що суперечить неспростовності Ψ , тому й неспростовності Φ .

Таким чином, клас S-субтавтологій збігається з класом неспростовних формул мови БКФЛ.

Наслідок. Формула Φ виконувана $\Leftrightarrow \neg\Phi$ не є S-субтавтологією.

Справді, Φ виконувана $\Leftrightarrow \neg\Phi$ спростовна $\Leftrightarrow \neg\Phi$ – не є S-субтавтологією.

Отже, для встановлення того, що формула Φ мови БКФЛ неспростовна, треба з'ясувати, чи Φ є S-субтавтологією. Для цього збудуємо нормалізанта формули Φ та з'ясуємо, чи вона тавтологія.

Для встановлення того, що формула Φ мови БКФЛ виконувана, достатньо з'ясувати, чи формула $\neg\Phi$ не є S-субтавтологією.

Таким чином, отримуємо:

Теорема 7. Проблема виконуваності та проблема неспростовності формул мови БКФЛ алгоритмічно розв'язні.

Висновки

Досліджено безкванторні композиційно-номінативні логіки квазіарних предикатів функціональних рівнів. Виділено три різновиди таких логік: без виділення композицій рівності, із композиціями слабкої (з точністю до визначеності) рівності та строгої рівності. Описано семантичні моделі та мови безкванторно-функціональних логік, досліджено їх семантичні властивості. Розглянуто нормальні форми термів і формул, введено поняття S-субтавтології. Запропоновано кодування нормальних термів, на цій основі для кожної формули, що не є S-субтавтологією, збудована інтерпретація, яка спростовує цю формулу. Доведено збіжність класів S-субтавтологій та неспростовних формул. Звідси отримано розв'язність проблем виконуваності та неспростовності формул.

References

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. Шкільняк С.С. Реномінативні композиційно-номінативні логіки з предикатами рівності / С.С. Шкільняк, Д.Б. Волковицький // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Сер.: фіз.-мат. науки. – 2014. – Вип. 3. – С. 195–202.
1. NIKITCHENKO, M. and SHKILNIAK, S. (2008). *Matematychna lohika ta teoria alhorytmiv*. Kyiv: VPC Kyivskyi Universytet.
2. NIKITCHENKO, M. and SHKILNIAK, S. (2013). *Prykladna lohika*. Kyiv: VPC Kyivskyi Universytet.
3. SHKILNIAK, S. and VOLKOVYTSKYI, D. (2014). Renominative composition-nominative logics with predicates of equality. In *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics & Mathematics*. No3. P. 195–202.

Надійшла до редколегії 15.09.15

РАДІОФІЗИКА

УДК 519.9

Обуховський В.В.¹, проф., д.ф.-м.н.,
Шилін А.В.², аспірант.

Порівняння моделей опису в'язкості бінарних молекулярних сумішей

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

² Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4д,
e-mail: shilin.andrey.v@gmail.com

V.V. Obukhovsky¹, Doc. Sci.,
A.V. Shilin², postgraduate student.

The comparison of viscosity description for molecular binary mixtures

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv,
83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: vobukhovsky@yandex.ua
yvo@univ.kiev.ua

² Taras Shevchenko National University of Kyiv,
83000, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: shilin.andrey.v@gmail.com

Порівнюються різні типи однопараметричних залежностей, що використовуються для опису ізоTERM в'язкості бінарних молекулярних сумішей. Розглянуто емпіричні формули, запропоновані Ареніусом, Грюнбергом-Ніссаном, Хінді. Знайдено границі областей розбіжності між різними формулюваннями законів в'язкості. Шляхом мінімізації зваженого квадратичного відхилення встановлено взаємозв'язок між різними коефіцієнтами в області спільного застосування формул Грюнберга-Ніссана і Хінді.

Ключові слова: ізоТЕРМА в'язкості, формула Грюнберга-Ніссана, формула Хінді.

The aim of this article is to compare the one-parameter empirical models which are used to describe the viscosity isotherms of binary molecular mixtures. We consider the empirical formula suggested by Arrhenius, Grunberg-Nissan and Hind. A relationship between empirical coefficients in common used formulas of Grunberg-Nissan and Hind was found by minimizing the weighted standard deviation.

It is shown that for certain relations between the parameters G_{12} and η_{12} selection formula that describes the behavior of viscosity is not a matter of principle. However, there are mixtures for which question of choice of law forms viscosity is fundamental. 18 binary mixtures were examined and respective coefficients (G_{12} and η_{12}) were identified for them. The undeniable advantage of Grunberg-Nissan and Hind models is their simplicity (only one adjustable parameter feature in the formulas). However, these laws lack versatility.

To describe more complex viscosity isotherms one parameter is not enough. Complexes (quasistable formations) can be formed by intermolecular bonds. Replacing binary mixture by three-components mixture allows us to expand the use of simple one-parameter models to describe more complex viscosity isotherms.

Knowledge of viscosity of binary mixtures is of great importance in many industrial processes. Therefore the search for more universal laws viscosity remains an urgent task.

Key Words: viscosity isotherms, Grunberg-Nissan equation, Hind equation

Статтю представив канд. фіз.-мат наук, доц. Савенков С.М.

1. Вступ

Експериментальному вивченню в'язкості бінарних розчинів присвячена велика кількість публікацій (наприклад, див. посилання в [1]). Було доведено, що в'язкість бінарних сумішей η

не може бути подана як адитивна функція концентрацій компонент N_1, N_2 , а має місце нелінійна залежність $\eta(N_1, N_2)$ [2-4]. До перших спроб опису концентраційної залежності η

можна віднести роботу [5]. В подальшому Кендаль та Мопрое [6] проаналізували формулу Арреніуса для 84 неасоційованих рідин використовуючи різні способи опису концентрацій, а саме в мольних, вагових та об'ємних долях. Достатньо вдалого погодження з експериментом не було досягнуто в жодному випадку. Відзначимо, що кращий результат був отриманий при вимірюванні концентрації в мольних долях.

В подальшому було запропоновано моделі з нелінійними залежностями, котрі відображали молекулярну взаємодію між складовими частинами сумішей [1]. Такі формули точніше описували концентраційну залежність коефіцієнта в'язкості, але область їхнього застосування залишалася невідомою.

В цій статті ми порівнюємо апроксимаційні формули Грюнберга-Ніссана та Хінді.

2. Емпіричні однопараметричні моделі Грюнберга-Ніссана та Хінді.

Аналізуючи наявні данні вимірів Арреніус зробив припущення про адитивність логарифмічних характеристик в'язкості [5].

$$\ln \eta_A = \sum_{i=1}^n x_i \ln \eta_{ii} \quad (1)$$

(тут і далі x_i - мольна доля i -тої компоненти). Вважалося, що залежність (1) достатньо точно характеризує коефіцієнти в'язкості ідеальних n -компонентних сумішей [7]. Проте швидко з'ясувалося, що для розчинів реальних рідин в багатьох випадках формула (1) погано описує концентраційну залежність коефіцієнта в'язкості в широких областях (що простягаються від малих до високих концентрацій). Таку невідповідність можна пояснити неврахуванням взаємодії між молекулами різних рідин в суміші [1].

Пізніше широке розповсюдження отримала апроксимаційна модель Грюнберга-Ніссана, яка в загальному випадку має такий вигляд [8]

$$\ln \eta_{GN} = \sum_{i=1}^n x_i \ln \eta_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n x_i x_j G_{ij} \quad (2)$$

(в рамках цієї моделі покладається $G_{ii} = 0$). На відміну від формули Арреніуса формула Грюнберга-Ніссана має нелінійний доданок другого порядку по концентраціям компонент суміші. Параметр взаємодії G_{ij} залежить від властивостей рідких компонент [2]. В найпростішому випадку - бінарної суміші (2) приймає вигляд

$$\ln \eta_{GN} = x_1 \ln \eta_{11} + x_2 \ln \eta_{22} + x_1 x_2 G_{12}, \quad (3)$$

де $x_1 + x_2 = 1$.

В роботі [9] було визначено, що для тих сумішей, що мають позитивне відхилення від закону Рауля, параметр G_{ij} приймає від'ємні значення (в переважній більшості достатньо малі за модулем). І навпаки, для тих сумішей, що мають негативне відхилення від закону Рауля, параметр G_{ij} приймає додатні (в деяких випадках чисельно досить великі) значення.

Хінді запропонував використовувати іншу апроксимаційну залежність [10]:

$$\eta_H = \eta_{11} x_1^2 + 2x_1 x_2 \eta_{12} + \eta_{22} x_2^2, \quad (4)$$

де x_1, x_2 - мольна доля відповідної компоненти ($x_1 + x_2 = 1$), η_{11}, η_{22} - в'язкість чистих компонент; η_{12} - коефіцієнт взаємної в'язкості (зрозуміло, що в такому трактуванні $\eta_{12} > 0$).

3. Аналіз формули Хінді

Неважко перевірити, що апроксимаційна модель Хінді лінеаризується за умови $\eta_{12} = \eta_{12}^0$, де

$$\eta_{12}^0 = (\eta_{11} + \eta_{22})/2 \quad (5)$$

Для виділення лінійної частини апроксимаційної залежності введемо фактор нелінійності $\Delta_{12} \geq -1$:

$$\eta_{12} = \eta_{12}^0 (1 + \Delta_{12}) \quad (6)$$

З врахуванням (6), в'язкість по Хінді η_H може бути подана у білінійній формі

$$\eta = A_0 + A_1 x_1 + A_2 x_1^2 \quad (7)$$

Вище позначено

$$A_0 = \eta_{22}, \quad (8-a)$$

$$A_1 = \eta_{11} - \eta_{22} + \Delta_{12}(\eta_{11} + \eta_{22}), \quad (8-b)$$

$$A_2 = -\Delta_{12}(\eta_{11} + \eta_{22}). \quad (8-g)$$

В певних випадках квадратична залежність (7) може мати екстремум при концентрації першої компоненти:

$$x_1^{extr} = \frac{1}{2} + \frac{(\eta_{11} - \eta_{22})}{2\Delta_{12}(\eta_{11} + \eta_{22})}, \quad (0 \leq x_1^{extr} \leq 1). \quad (9)$$

На рис.1 показані ізотерми в'язкості, котрі можуть бути описані апроксимаційною формулою Хінді, в залежності від параметра нелінійності Δ_{12} . У випадку $\Delta_{12} = 0$ маємо лінійну залежність. При $\Delta_{12} > 0$ крива в'язкості вигнута донизу, а при $\Delta_{12} < 0$ - доверху. Так як в межах даної апроксимації параметр Δ_{12} є сталою

величину, то апроксимаційна крива не має точок перегину.

Зауважимо, що формула Хінді має певні обмеження області застосування. Наприклад, її

не можна застосовувати для опису S-подібних ізоTERM в'язкості, що характерні для суміші толуол – метиловий спирт [11], так як останні описуються кривими третього порядку.

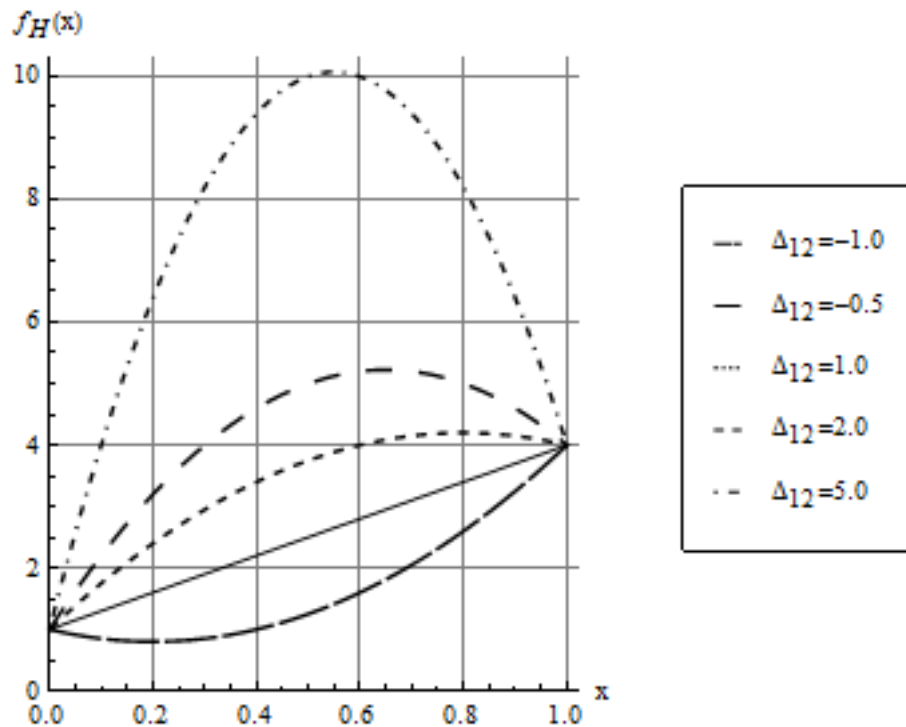


Рис.1 Залежність ізоTERM в'язкості, від параметра нелінійності Δ_{12} в рамках апроксимаційного рівняння Хінді.

4. Порівняння формул Ареніуса та квадратичної апроксимації Хінді.

Для зручності перейдемо до перенормованих величин. Формула Ареніуса (1) еквівалентна до функції

$$f_A = \eta_A / \eta_{22} = \delta^{x_1}, \quad (10)$$

де $\delta = \eta_{11} / \eta_{22}$ - відношення коефіцієнтів в'язкості. Останні вимірюються в незалежних експериментах.

Для формули Хінді (4) можна записати відповідне співвідношення у безрозмірних змінних:

$$f_H = \frac{\eta_H}{\eta_{22}} = \delta x_1^2 + 2x_1(1-x_1)\chi + (1-x_1)^2. \quad (11)$$

Крім δ в (11) фігурує додатковий параметр $\chi = \eta_{12} / \eta_{22}$ - що може трактуватись як «відносна взаємна в'язкість». В такому випадку $\chi > 0$. Він не вимірюється в незалежних

експериментах і може розглядатися як підгоночний параметр.

Розглянемо нормоване середньоквадратичне відхилення між апроксимаційними формулами Хінді $f_H(x)$ та Ареніуса $f_A(x)$, що стосуються сумішей із однаковими δ :

$$\sigma(\delta, \chi) = 2 \left[\int_0^1 \left(\frac{f_A - f_H}{(f_A + f_H)} \right)^2 dx \right]^{1/2} \quad (12)$$

Шляхом мінімізації невязки можна знайти χ^{opt} (при фіксованому δ), при якому обидві формули (Ареніуса і Хінді) дають максимально близькі результати ($\sigma(\delta, \chi^{opt}) = \sigma_{min}(\delta)$). Реалізація такої мінімізації може бути зроблена із застосуванням Wolfram Mathematica. Отримані результати проілюстровані на рис.2,3.

Надалі буде розглядатися діапазон $\delta \in [1, 4]$, тобто суміші, де в'язкість первісних компонент відрізняється не більше ніж 4 рази.

Заради визначеності, будемо обирати за першу компоненту таку, де в'язкість найбільша (тобто $\eta_{11}/\eta_{22} > 1$). Середньоквадратичне відхилення апроксимаційних кривих Хінді та Ареніуса збільшується при збільшенні

відмінності в'язкості компонент суміші (див. рис.2), але в обраній області $\delta \in [1,4]$ залишається меншою від 2% (тобто на рівні точності експериментального визначення в'язкості).

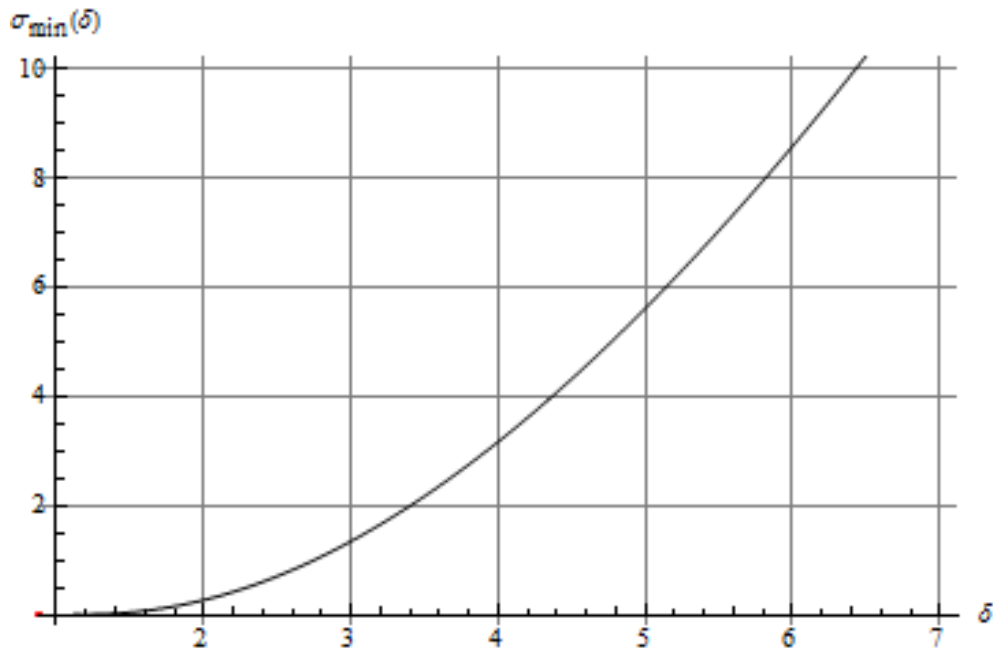


Рис. 2 Розбіжність $\sigma_{\min}$ між формулами Ареніуса і Хінді, як функція відношення в'язкостей вихідних компонент $\delta = \eta_{11}/\eta_{22}$ при оптимальному виборі параметра взаємної в'язкості χ^{opt} .

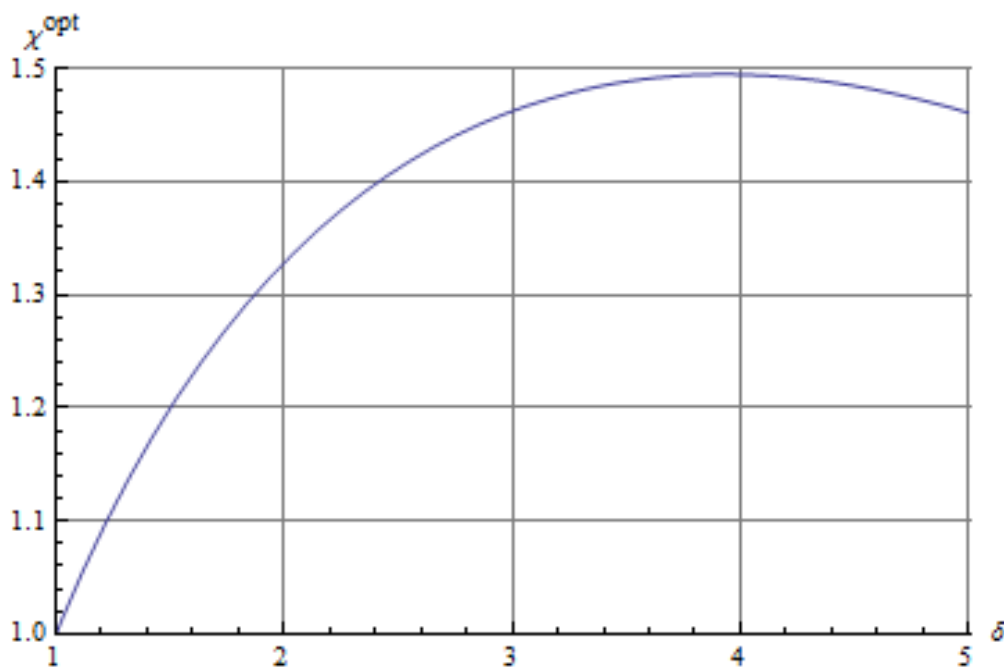


Рис.3 Залежність $\chi^{opt}(\delta)$ при якій формули Грюнберга-Ніссана і Хінді дають максимально близькі результати. Різниця відповідає $\sigma_{\min}$ (див. рис.2)

Відповідні оптимальні значення ілюструються на Рис.3. Як бачимо, χ^{opt} змінюється в обмежених границях, причому досягає максимуму при $\delta \approx 4$.

5. Порівняння формул Грюнберга-Ніссана та квадратичної апроксимації Хінді.

Формула Грюнберга-Ніссана може бути записана у перенормованому вигляді

$$f_{GN} = \eta_{GN} / \eta_{22} = \delta^{x_1} \exp[x_1(1-x_1)G_{12}]. \quad (13)$$

Порівнюючи між собою залежності Грюнберга-Ніссана та Хінді (в перенормованому вигляді), відзначимо, що на кінцях інтервалу концентрацій функції (11), (13) співпадають.

$$\begin{cases} f_H(0) = f_{GN}(0) = 1, \\ f_H(1) = f_{GN}(1) = \delta. \end{cases} \quad (14)$$

Враховуючи, що коефіцієнт G_{12} розглядається як деякий апроксимаційний параметр моделі Грюнберга-Ніссана, можна підібрати його таким чином, щоб f_H і f_{GN} співпадали, ще в одній точці. Найпростіший спосіб такий: як додаткову умову взяти рівність двох функцій посередині інтервалу концентрацій (тобто в точці $x = 0.5$):

$$f_H(0.5) = f_{GN}(0.5). \quad (15)$$

підгоночного параметру χ^{opt} (взаємної в'язкості Нескладно перевірити, що рівність (15) вимагає реалізації умови

$$G_{12} = G_{12}^0 = 4 \ln \left(\frac{\delta + 2\chi + 1}{4\sqrt{\delta}} \right) \quad (16)$$

Співпадіння двох плавних кривих в трьох точках може гарантувати близькість апроксимаційних функцій Грюнберга-Ніссана та Хінді в усіх проміжних точка (зважаючи на подібність геометричних форм). Тому можна сподіватись, що є суміші, котрі добре описуються обома формулами: як формулою Грюнберга-Ніссана, так і формулою Хінді. Графічне відображення (16) представлене на рис.4. Як бачимо, значення апроксимаційного коефіцієнта $G_{12}^{opt}(\delta, \chi)$ може набувати, як додатніх, так і від'ємних значень в залежності від співвідношення між величинами δ і χ . Якщо має місце додатнє відхилення від першого закону Рауля, то апроксимаційний параметр рівняння Хінді найбільш імовірно приймає значення $\chi < 2\sqrt{\delta} - (\delta + 1)/2$. У випадку від'ємного відхилення від першого закону Рауля – $\chi > 2\sqrt{\delta} - (\delta + 1)/2$.

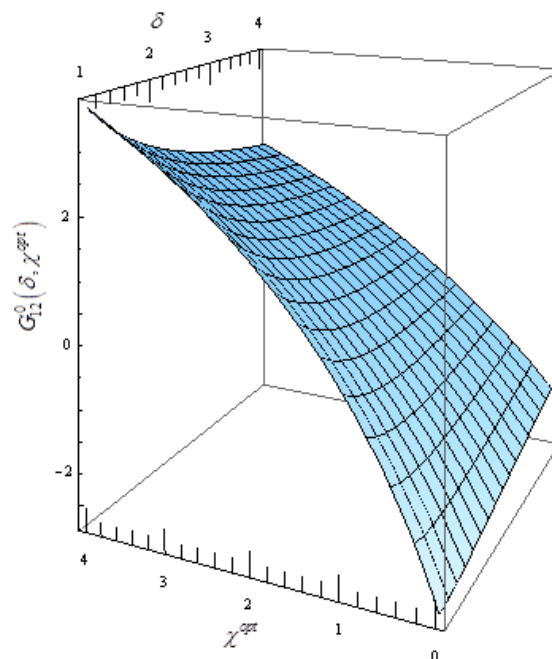


Рис.4 Залежність $G_{12}(\delta, \chi^{opt})$.

Для більш ґрунтового аналізу, було розглянуто нормовану середньоквадратичну

розбіжність (нев'язку) між апроксимаційними формулами Хінді $f_H(x)$ та Грюнберга-Ніссана

$f_{GN}(x)$, що стосуються сумішей із однаковими δ :

$$\sigma(\delta, G_{12}, \chi) = 2 \left[\int_0^1 \left(\frac{f_{GN} - f_H}{(f_{GN} + f_H)} \right)^2 dx \right]^{1/2} \quad (17)$$

Шляхом мінімізації невязки можна знайти зв'язок між параметрами χ^{opt} та G_{12}^{opt} (при фіксованому δ), при яких обидві формули (Хінді та Грюнберга-Ніссана) дають максимально близькі результати ($\sigma(\delta, G_{12}^{opt}, \chi^{opt}) = \min\{\sigma(\delta)\}$). Отримані результати проілюстровані на рис.4 в полі параметра χ^{opt} .

На рис.4 показано області співпадіння формул Хінді та Грюнберга-Ніссана в межах заданої точності σ (остання визначається по середньоквадратичному відхиленні) при умові

оптимального узгодження значень підгоночних параметрів η_{12} і G_{12} . Для ілюстрації в координатному просторі δ, χ на графіку відображено параметри ряду бінарних сумішей (див. підпис під малюнком).

Для сумішей, параметри яких потрапляють в область А (середньоквадратична розбіжність не перевищує 1%), не є принциповим питання вибору форми закону в'язкості. В цьому випадку можна використовувати, як формулу Грюнберга-Ніссана так і Хінді (формула (16) буде досить точно описувати зв'язок між параметрами моделей). Для областей В, С, D і Е питання використання тої чи іншої формули стає принциповим (в цьому випадку втрачається зв'язок (16) між параметрами моделей).

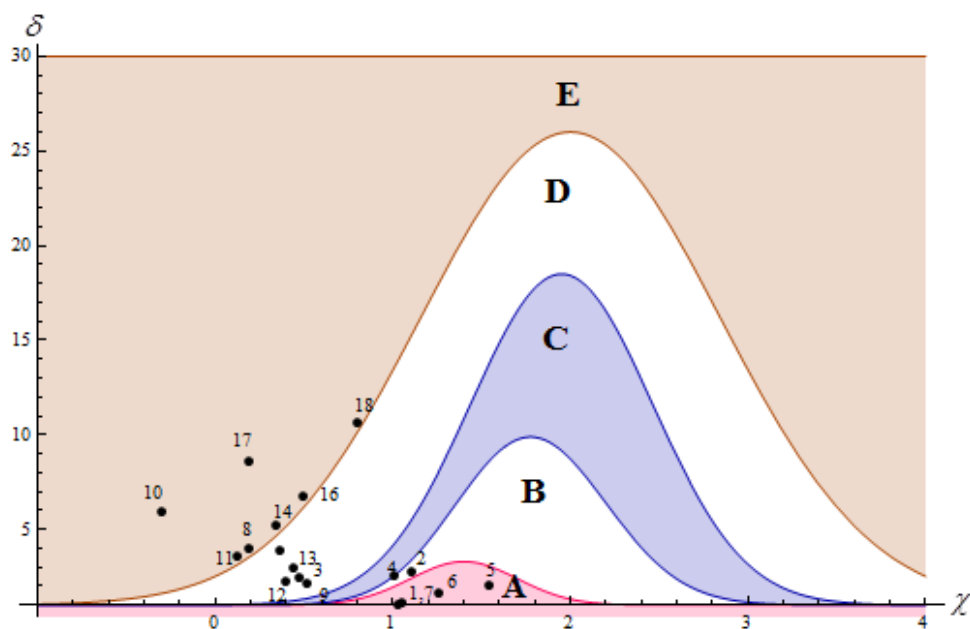


Рис.4 Области $Z = A, B, C, D, E$ значень параметрів $\{\delta, \chi\}$ для заданої середньоквадратичної розбіжності $\sigma(Z)$ між результатами обчислень за формулами Грюнберга-Ніссана та Хінді при оптимальному виборі взаємозв'язку між параметрами χ і G_{12} . Якщо параметри системи $\{\delta, \chi\}$ потрапляють в область Z , то максимальна розбіжність складає (у відсотках):

$$0 \leq \sigma(A) \leq 1, \quad 1 \leq \sigma(B) \leq 3, \quad 3 \leq \sigma(C) \leq 5, \quad 5 \leq \sigma(D) \leq 8, \quad \sigma(E) \geq 8.$$

Цифри біля точок відповідають сумішам: 1 – [1,2-Dichlorobencene+1,4-Dioxane]; 2 – [1,4-Dioxane+Ethyl Acetate]; 3 – [1-Butanol+1,4-Dioxane]; 4 – [1,4-Dioxane+Trichloroethylene]; 5 – [2-Chloroethanol+1,4-Dioxane]; 6 – [Diethylmalonate+1,4-Dioxane]; 7 – [N,N-Dimethylacetamide+1,4-Dioxane]; 8 – [2-Propanol+Octane]; 9 – [2-Propanol+Decane]; 10 – [2-Butanol+Octane]; 11 – [2-Butanol+Decane]; 12 – [2-Butanol+Dodecane]; 13 – [1-Pentanol+Phenetole]; 14 – [1-Hexanol+Phenetole]; 15 – [1-Heptanol+Phenetole]; 16 – [1-Octanol+Phenetole]; 17 – [1-Nonanol+Phenetole]; 18 – [1-Decanol+Phenetole].

На закінчення відзначимо, що в'язкість суміші рідин залежить від стадії структуроутворюючих процесів, а також визначається механізмами міжмолекулярної взаємодії. Наприклад, при змішування рідин $[A]$ і $[B]$ можуть утворюватися молекулярні комплекси (наприклад, типу $[AB]$) з часом життя значно більшим в порівнянні з періодом коливань молекул в рідині. Зрозуміло, що ці сполуки в ході передачі кількості руху треба розглядати як рівноцінну третю компоненту. В цьому випадку кількість складових в формулах Грюнберга-Ніссана та Хінді збільшиться (як мінімум) до $n = 3$. Подібні міркування можуть пояснити причину складної концентраційної залежності коефіцієнтів в'язкості ряду сумішей (наприклад: суміші толуол – метиловий спирт), що не може бути описана жодним із розглянутих вище законів.

Висновки:

В роботі знайдено границі взаємозамінного застосування формул Грюнберга-Ніссана і Хінді для опису концентраційної залежності коефіцієнта динамічної в'язкості в бінарних молекулярних сумішах (в межах заданої точності). Наприклад, якщо параметри системи потрапляють в область А (рис.4), а точність

експериментальних вимірів не перевищує 1%, то неможливо надати пріоритет застосуванню однієї з форм опису (закон Грюнберга-Ніссана чи Хінді). Для таких випадків знайдено взаємозв'язок між параметрами конкуруючих формул (див. (16)). Також указано на взаємозв'язок між першим законом Рауля і параметрами взаємної в'язкості.

Незаперечним достоїнством законів Грюнберга-Ніссана та Хінді є їхня простота (в формулах фігурує тільки по одному підгоночному параметру (або η_{12} , або G_{12})). Проте цим законам бракує універсальності. Дійсно, як показано в роботах [3,6] для деяких типів сумішей кращі результати дає опис за формулою Грюнберга-Ніссана, але для інших – за формулою Хінді.

Тому пошук більш універсальних законів в'язкості залишається актуальною задачею. Складний характер концентраційної залежності величини в'язкості пов'язаний із різноманітністю міжмолекулярних взаємозв'язків в рідких розчинах. Відзначимо, що цьому плані вельми гнучкими є широко застосовані в хімії моделі асоціатів та комплексів.

Список використаних джерел

1. Viscosity of liquids / Dabir S. Viswanath, Tushar K. Ghosh, Dasika H. L. Prasad, Nidamarty V. K. Dutt. – The Netherlands: Published by Springer, 2007. – 660 p.
2. Poling B. The properties of gases and liquids./ Poling B., Prausnitz J., O'connell J. – New York: McGraw-Hill, 2001.
3. An equation for the correlation of viscosities of binary mixtures / J.V. Herraiez, R. belda, O. Diez, M. Herraiez. // J Solution Chem. – 2008. – 37. – P. 233–248.
4. Volumetric, Speed Of Sound Data and Viscosity for the Binary Mixtures of 2-Methylaniline with Aliphatic Ketones and Cyclic Ketones at Different Temperatures / V.Venkatalakshmi, A .Chowdappa, P. Venkateswarlu, K.S. Redd. // IJIRST. – 2014. –3. – P. 17556–17566.

References

1. VISWANATH, D. (2007). *Viscosity of liquids*. Dordrecht: Springer.
2. POLING, B., PRAUSNITZ, J. AND O'CONNELL, J. (2001). *The properties of gases and liquids*. New York: McGraw-Hill
3. HERRÁEZ, J., BELDA, R., DÍEZ, O. AND HERRÁEZ, M. (2008). An Equation for the Correlation of Viscosities of Binary Mixtures. *Journal of Solution Chemistry*, 37(2), p.233-248.
4. V.VENKATALAKSHMI, A .CHOWDAPPA, P. VENKATESWARLU, K.S. REDD (2014).Volumetric, Speed Of Sound Data and Viscosity for the Binary Mixtures of 2-Methylaniline with Aliphatic Ketones and Cyclic Ketones at Different Temperatures, *IJIRST*, 3, p.17556–17566.

5. Kendall. J. Viscosity of liquids. III. Ideal solutions of solids in liquids / J. Kendall, K. P. Monroe. // *J. Am. Chem. Soc.* – 1917. – **39**. – P. 1802–1806.
6. Arrhenius S. Über die Dissociation der in Wasser gelosten Stoffe / S.A. Arrhenius. // *Z.Phys.Chem.* – 1887. – **1**. – P. 631–648.
7. G. Okunev. A new approach to the calculation of viscosity of liquid hydrocarbon mixtures based on modified Arrhenius equation/ G. Okunev, E.V. Parkhomchuk, A.I. Lysikov, V.S. Derevshchikov.//*ISJAE*. – 2011. – **9**(113). P. 178-181.
8. Grunberg. L. Mixture law for viscosity / L.Grunberg, A.H.Nissan. // *Nature*. – 1949. – **164**. – P. 799–800.
9. Isdale J.D. Prediction of Viscosity of Organic Liquid Mixtures by a Group Contribution Method / J.D. Isdale, J.C. MacGillivray, G. Cartwright. – Glasgow, Scotland: Natl. Eng. Lab. Rept. East Kilbride, 1985.
10. Hind R.K. Structure and viscosity of liquids. Camphor + pyrene mixtures / R.K. Hind, E. McLaughlin, U.R. Ubbelohde. // *Trans. Farad. Soc.* – 1960. – **56**. – P. 328–330.
11. Pandharinath S. Nikam Viscosities of Binary Mixtures of Toluene with Methanol, Ethanol, Propan-1-ol, Butan-1-ol, Pentan-1-ol, and 2-Methylpropan-2-ol at (303.15, 308.15, 313.15) K / Pandharinath S. Nikam, Bapu S. Jagdale, Arun B. Sawant, Mehdi Hasan. // *J. Chem. Eng. Data*. – 2000. – **45**. – P. 559–563.
5. KENDALL, J. and MONROE, K. (1917). The viscosity of liquids. iii. ideal solutions of solids in liquids. *J. Am. Chem. Soc.*, 39(9), pp.1802-1806.
6. ARRHENIUS S. (1887) Über die Dissociation der in Wasser gelosten Stoffe, *Z.Phys.Chem.*,1, pp.631–648.
7. G. OKUNEV, E.V. PARKHOMCHUK, A.I. LYSIKOV, V.S. DEREVSHCHIKOV (2011). A new approach to the calculation of viscosity of liquid hydrocarbon mixtures based on modified Arrhenius equation. *ISJAE*., 9(113), pp. 178-181.
8. GRUNBERG, L. and NISSAN, A. (1949). Mixture Law for Viscosity. *Nature*, 164(4175),
9. ISDALE J.D. (1985) Prediction of Viscosity of Organic Liquid Mixtures by a Group Contribution Method. Glasgow, Scotland: *Natl. Eng. Lab. Rept. East Kilbride*
10. HIND, R., MCLAUGHLIN, E. and UBBELOHDE, A. (1960). Structure and viscosity of liquids. Camphor + pyrene mixtures. *Trans. Faraday Soc.*, 56, p.328.
11. S. NIKAM, P., S. JAGDALE, B., B. SAWANT, A. and HASAN, M. (2000). Viscosities of Binary Mixtures of Toluene with Methanol, Ethanol, Propan-1-ol, Butan-1-ol, Pentan-1-ol, and 2-Methylpropan-2-ol at (303.15, 308.15, 313.15) K. *J. Chem. Eng. Data*, 45, p.559.

Надійшла до редколегії 10.09.2015

УДК 535.345.67

Первак Ю.О., д.ф.-м.н., проф.

Вплив поглинання на спектральні характеристики дисперсійних дзеркал

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4г,
e-mail: yupervak@univ.kiev.ua

Yu.O. Pervak, Dr. Sci.

Impact of absorption on the spectral characteristics of dispersive mirrors

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova st., 4g,
e-mail: yupervak@univ.kiev.ua

Досліджено вплив поглинання на спектральні і просторово-спектральні характеристики дисперсійного дзеркала з робочим діапазоном від 750 до 850 нм, в якому дзеркало має лінійну залежність групової затримки (GD) і негативну дисперсію групової затримки (GDD). Середній рівень GDD дорівнює -600 фс^2 . Дзеркало утворено нанесенням на скляну підкладку багатошарової структури (73 шари) з оксидів ніобію і кремнію, що чергуються. Повна фізична товщина багатошарової структури дорівнює 9331,7 нм. В структурі налічується сім резонаторів, кожен з яких утворений трьома сусідніми шарами. Центральний шар в двох резонаторах має високий показник заломлення, а в п'яти – низький. Електричне поле завжди концентрується в центральних і бічних шарах з низьким показником заломлення. Поглинання в шарах структури приводить до суттєвого зменшення коефіцієнта відбивання і напруженості електричного поля, що концентрується в резонаторах. Фазові характеристики (фаза відбитого випромінювання, його групової затримки і дисперсія групової затримки від поглинання) не залежать.

Ключові слова: дисперсійне дзеркало, негативна дисперсія групової затримки

The influence of absorption on spectral and spatially spectral descriptions of dispersible mirror with the working range from 750 to 850 nm, in which a mirror has linear dependence of group delay (GD) and negative dispersion of group delay (GDD) were investigated. A mirror has linear dependence of group delay (GD) and negative group delay dispersion (GDD). The middle level of GDD equals -600 fs^2 . A mirror consists of deposited multilayer structure (73 layers) from the oxides of niobium and silicon that alternate on the glass substrate. The complete physical thickness of multi-layer structure equals 9331,7 nm. Seven resonators are counted in a structure, each of which is formed by three nearby layers. A central layer in two resonators has a high index of refraction, and in five – low. The electric field is always concentrated in central and lateral layers with the low index of refraction. Absorption in the layers of structure results in the substantial diminishing of coefficient of reflection and tension of the electric field which is concentrated in resonators. Phase-shift-frequencies (phase of the reflected radiation, its group delay and dispersion of group delay) does not depend from absorption.

Key words: dispersive mirror, negative group delay dispersion

Статтю представив д.техн.н., проф. Погорілий С.Д.

Прогрес в технології дисперсійних дзеркал (ДД) [1-5] дозволив подолати проблему компенсації дисперсії при генерації фемто- і аттосекундних імпульсів [6, 7]. Оптичні елементи на основі ДД забезпечують точний контроль GD і GDD у різних частотних діапазонах, що дуже важливо при створенні фемтосекундних лазерів. Однак, отримання необхідного для компенсації дисперсії високого рівня негативної GDD часто вимагає використовувати схеми компенсаторів, що налічують десятки ДД. Якщо відбивання окремого

ДД дорівнює 99%, то в результаті лише десяти відбивань інтенсивність світлового сигналу зменшується майже на 10%. Тому відбивання кожного окремого ДД повинно бути максимально високим. Основним чинником зменшення відбивання є поглинання в багатошаровій структурі ДД. Окрім відбивання, іншими важливими характеристиками ДД є групової затримка (GD) і дисперсія групової затримки (GDD), вигляд спектральної залежності яких визначається структурою ДД. Необхідні спектральні характеристики ДД

отримують за допомогою чисельного моделювання їх структури. Керування цими характеристиками означає керування просторово-спектральним розподілом електромагнітного поля в структурі ДД.

Метою даної роботи було дослідження впливу поглинання в окремих шарах ДД на основні його характеристики. В якості модельного об'єкту було вибрано ДД, структура і спектральні характеристики якого при відсутності поглинання досліджено в роботі [8]. Дзеркало утворено нанесенням на скляну підкладку багатошарової структури (73 шари) з оксидів ніобію (Nb_2O_5) і кремнію (SiO_2), що чергуються. Повна фізична товщина багатошарової структури дорівнює 9331,7 нм. ДД має лінійну залежність групової затримки (GD) і максимальну негативну дисперсію групової затримки (GDD).

Процедура отримання досліджуваних характеристик ДД з використанням програмного пакету Optilayer [9, 10] детально описана раніше [11]. Вплив поглинання досліджено шляхом введення незалежних від частоти значень показника поглинання $k = 10^{-3}$, 10^{-4} і 10^{-5} .

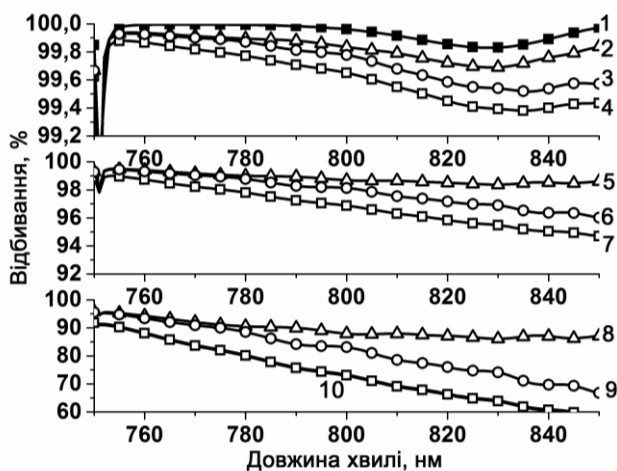


Рис.1. Відбивання ДД без поглинання (1) та наявності поглинання лише в шарах SiO_2 (3, 6, 9), лише в шарах Nb_2O_5 (2, 5, 8), в усіх шарах (4, 7, 10). Показник поглинання k дорівнює: 0 (1), 10^{-5} (2, 3, 4), 10^{-4} (5, 6, 7), 10^{-3} (8, 9, 10),

На рис.1 приведено спектральні зміни коефіцієнта відбивання ДД при відсутності і наявності поглинання в шарах структури ДД. При відсутності поглинання коефіцієнт відбивання вищий за 99,8% в усьому робочому діапазоні ДД (750 – 850 нм). При наявності поглинання лише в шарах Nb_2O_5 коефіцієнт відбивання зменшується, причому це зменшення буде меншим порівняно з

випадком поглинання лише в шарах SiO_2 . Це пояснюється тим, що сумарна фізична товщина шарів Nb_2O_5 складає 3796,112 нм, а шарів SiO_2 – 5547,435 нм. Відповідні сумарні значення оптичної товщини майже однакові і складають 8593,741 нм для шарів Nb_2O_5 та 8111,148 нм для шарів SiO_2 на довжині хвилі середини робочого діапазону (800 нм). Якщо поглинання відбувається в усіх шарах коефіцієнт відбивання зменшується ще більше, але це зменшення не є простою сумою зменшення відбивання при поглинанні в шарах Nb_2O_5 і SiO_2 . Це пов'язано із тим, що загальне зменшення коефіцієнта відбивання залежить від зменшення амплітуди електромагнітної хвилі внаслідок поглинання при багаторазовому проходженні окремих шарів структури ДД. При одноразовому проходженні шару товщиною d амплітуда хвилі зменшується в $\exp(-2\pi k/\lambda)$ разів. При $k = 10^{-3}$ в усіх шарах ДД на довгохвильовій межі робочого діапазону коефіцієнт відбивання зменшується до 60%.

На відміну від відбивання, фазові характеристики (зміна фази при відбиванні $\varphi = \text{Im}(r)/\text{Re}(r)$, де r – амплітудний коефіцієнт відбивання; групова затримка $\text{GD} = d\varphi/d\omega$; дисперсія групової затримки $\text{GDD} = d^2\varphi/d\omega^2$) від поглинання не залежать. Для прикладу на рис.2-4 наведено спектральні залежності зміни фази, групової затримки і дисперсії групової затримки, відповідно. Спектральні залежності фазових характеристик абсолютно однакові при будь-яких значеннях показника поглинання k .

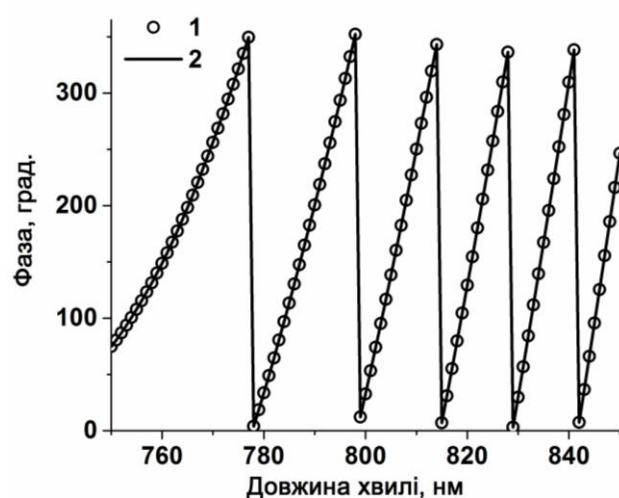


Рис.2. Спектральна залежність зміни фази при відбиванні при відсутності (1) і наявності (2) поглинання.

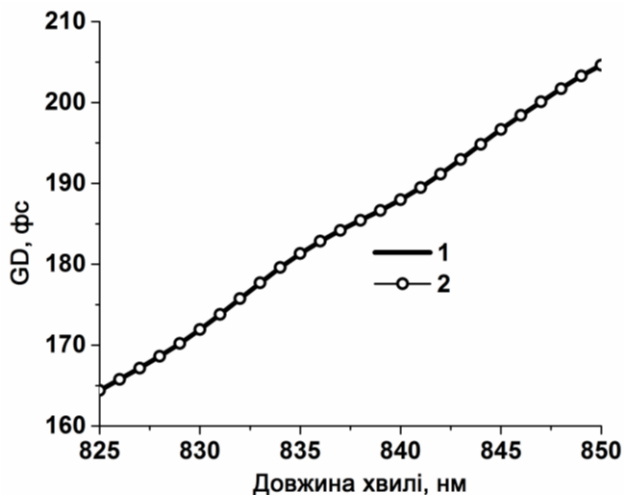


Рис.3. Спектральна залежність GD при відсутності поглинання (1) і при наявності ахроматичного поглинання (2).

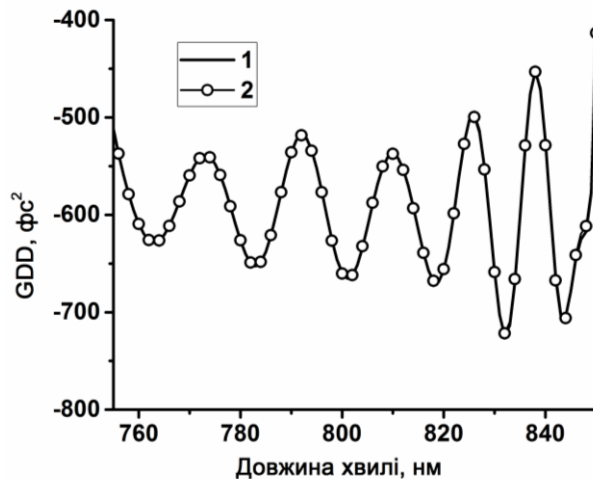


Рис.4. Спектральна залежність GDD при відсутності поглинання (1) і при наявності ахроматичного поглинання (2).

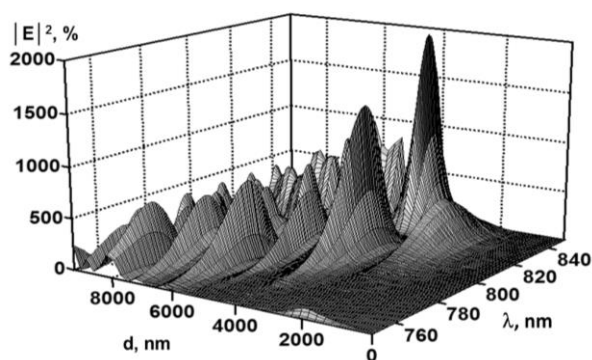


Рис.5. Просторово-спектральний розподіл електричного поля $|E|^2$ при відсутності поглинання.

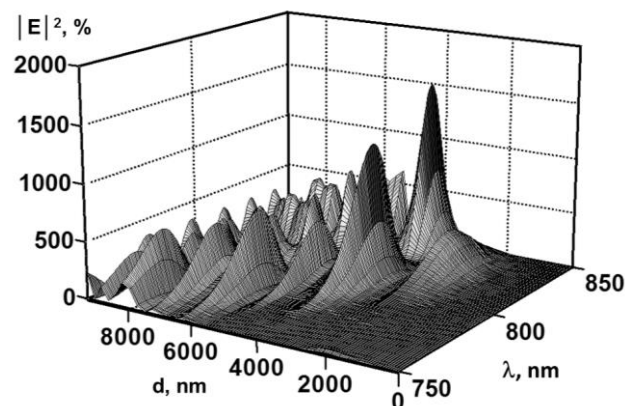


Рис.6. Просторово-спектральний розподіл електричного поля $|E|^2$ при наявності поглинання в усіх шарах ДД ($k = 10^{-3}$).

Раніше було показано [8], що принциповою відмінністю досліджуваного ДД є наявність в його конструкції пів хвильових резонаторів. І саме тому такі конструкції дзеркал називають дисперсійними дзеркалами, на відміну від традиційних чирпованих дзеркал [1], які вперше дозволили отримати негативну дисперсію групової затримки і вирішити проблему компенсації дисперсії надкоротких світлових імпульсів. В традиційних чирпованих дзеркалах не було півхвильових резонаторів, а збільшення GD з довжиною хвилі і значно менша, ніж в ДД негативна GDD досягалися за рахунок поступового збільшення оптичної товщини шарів від зовнішнього середовища до підкладки. В ДД з резонаторами необхідні значення GD і GDD досягаються завдяки

концентрації електричного поля в резонаторах. Наявність поглинання зменшує абсолютну величину електричного поля в резонаторах, але залишає незмінним загальний вигляд просторово-спектрального розподілу електричного поля.

Таким чином, для виготовлення дисперсійних дзеркал з високим рівнем відбивання і необхідними фазовими характеристиками необхідно використовувати матеріали з надзвичайно низьким поглинанням. Показник поглинання матеріалів повинен бути не менш ніж на порядок меншим за значення $k = 10^{-5}$. Зміна фазових характеристик ДД відбуватиметься лише при зміні величини дійсної частини комплексного показника заломлення.

Список використаних джерел

1. Szipocs R. Chirped multilayer coatings for broadband dispersion control in femtosecond lasers / R. Szipocs, K. Ferencz, C. Spielmann, F. Krausz // *Opt. Lett.*—1994—**19**— N.3.— P.201–203.
2. Pervak V. High-dispersive mirrors for femtosecond lasers/ V.Pervak, C.Teisset, A.Sugita, et al.//*Opt.Express.* — 2008.—**16** — N.14. — P. 10220–10233.
3. Pervak V. High-dispersive mirrors for high power applications / V. Pervak, O. Pronin, O. Razskazovskaya, et al. // *Opt. Express.* — 2012. —**20**. — N.4. — P.4503–4508.
4. Pervak V. Recent development and new ideas in the field of dispersive multilayer optics / V. Pervak // *Appl.Opt.*—2011. —**50**. — N.9. — P.C55–C61.
5. Nohadani O., Birge J.R., Kartner F.X., Bertsimas D.J. Robust chirped mirrors / O. Nohadani, J.R. Birge, F.X. Kartner, D.J. Bertsimas // *Appl. Opt.* — 2008. —**47**. — N.14. — P.2630–2636.
6. Pervak V. Robust synthesis of dispersive mirrors / V. Pervak, M.K. Trubetskov, A.V. Tikhonravov // *Opt.Express.*—2011.—**19**—N.3.—P.2371–2380.
7. Krausz F. Attosecond physics / F. Krausz // *Rev. Mod. Phys.* — 2009. —**81**. — N.1. — P.163–234.
8. Pervak Yu.O. Features of the structure of dispersive mirrors with negative group delay / Yu.O. Pervak // *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Ser.: Phys.&Mathematics.* — 2015. - №2. — P. 259–262.(in Ukrainian).
9. Tikhonravov A.V. Phase properties of multilayers / A.V. Tikhonravov, B.W. Baumeister, K.V. Popov // *Appl. Opt.* — 1997. —**36**. — N.19. — P.4382–4392.
10. Tikhonravov A.V. OptiLayer software / A.V. Tikhonravov., M.K. Trubetskov// <http://www.optilayer.com>.
11. Pervak V. Empirical study of the group delay dispersion achievable with multilayer mirrors / V. Pervak, V. Fedorov, Yu.A. Pervak, M.K. Trubetskov // *Opt. Express.* —2013. —**21**. — N.15. — P.18311–18316.

References

1. SZIPOCS, R. et al.(1994) Chirped multilayer coatings for broadband dispersion control in femtosecond lasers. *Opt. Lett.* 19 (3). p. 201–203.
2. PERVAK, V. et al. (2008) High-dispersive mirrors for femtosecond lasers. *Opt. Express.* 16 (14). p.10220–10233.
3. PERVAK, V. et al.(2012) High-dispersive mirrors for high power applications. *Opt. Express.* 20 (4). p.4503–4508.
4. PERVAK, V. (2011) Recent development and new ideas in the field of dispersive multilayer optics. *Appl. Opt.* 50 (9). p. C55–C61.
5. NOHADANI, O. et al. (2008) Robust chirped mirrors. *Appl. Opt.* 47 (14). p.2630–2636.
6. PERVAK, V. & Trubetskov, M., Tikhonravov, A. (2011) Robust synthesis of dispersive mirrors. *Opt. Express.* 19. N.3. P.2371–2380.
7. KRAUSZ, F. (2009) Attosecond physics. *Rev. Mod. Phys.* 81 (1). p.163–234.
8. PERVAK Yu.O. (2015) Features of the structure of dispersive mirrors with negative group delay. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Ser.: Phys.&Mathematics.* №2. P. 259–262.(in Ukrainian).
9. TIKHONRAVOV, A.V. & BAUMEISTER, B.W. POPOV, K.V. Phase properties of multilayers. *Appl. Opt.* 36 (19). p.4382–4392.
10. TIKHONRAVOV A.V. & TRUBETSKOV M.K. OptiLayer software. <http://www.optilayer.com>.
11. PERVAK, V. et al.(2013) Empirical study of the group delay dispersion achievable with multilayer mirrors. *Opt. Express.* 21 (15). p.18311–18316.

Надійшла до редколегії 12.10.2015

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 535.376

Весна Г.В.¹, к.ф.-м.н.,
Гуменюк А.Ф.², к.ф.-м.н., доц.
Дегода В.Я.³, д.ф.-м.н., с.н.с,
Маразуєв Ю.А.⁴ к.ф.-м.н., доц.

G.V.Vesna¹, PhD,
A.F.Gumenuk², PhD,
V.Y Degoda³, Dr. Sci., Sen. Sci. Res.,
U.A.Marazuev⁴, PhD.

Кінетика рекомбінаційної люмінесценції і провідності кристаллофосфорів

1. Накопичення носіїв заряду на мільких пастках

^{1,2,3,4}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail:galyna.vesna@gmail.com

The kinetic of the recombination luminescence and conductivity of crystallophosphorus

1. The accumulation charge carrier on shallow traps

^{1,2,3,4}Kyiv Taras Shevchenko National University,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail:galyna.vesna@gmail.com

В розвиток класичних теорій кінетики люмінесценції і провідності розглянута модель кристаллофосфору яка містить три типи пасток (мілька, фосфоресцентна, глибока) та два конкуруючі між собою центри свічення. Використовуючи прийняті в класичних теоріях наближення, одержали прості наближені розв'язки системи кінетичних рівнянь в аналітичному вигляді для випадку, коли при певній температурі збудження в матеріалі присутні декілька типів мільких пасток. Встановлено вплив мільких пасток на люмінесценцію і провідність.

Ключові слова: фотолюмінесценція, фотопровідність, кристаллофосфор або широкозонний напівпровідник, центр рекомбінації (свічення)

A model of crystallophosphorus was studied as a development of the classical theories of kinetic of luminescence and conductivity. This model has 3 types of traps (shallow, phosphorescent, deep) and 2 compete luminescence centres. The easy approximate solutions of simultaneous kinetic equations was done using the existing in classical theories approximations. These solutions exist by specified excitation temperature in material when a few small traps are present. The influence of shallow traps on luminescence and conductivity was determined. Dependences of the concentration of free and localization charges carrier on shallow and deep traps was received at start excitation. Specified that the shallow traps influence insignificantly on the stationary recombinative luminescence because it doesn't change living time of free electrons in conducting band. However, shallowtraps influenceessentially on current conductor value because the part of free electrons was localised on this traps. Moreover significant influence of shallow traps on frequency characteristics of the luminescence and conductivity at using modulation excited radiation was found. The important peculiarity for accumulation charges carrier on shallow traps are that the form of curves of the concentration of the charges carrier $n_k(t)/n_{ok}$ and $N(t)/N_0$ are identical at different excitation intensity. The recharges speed of the shallow traps is identical at different generation intensity of the charges carrier in different layer of a specimen on the different depth from surface irradiation.

Key words: photoluminescence, photoconductivity, crystallophosphorus, wide-band-gap semiconductor, trap, recombination (light) centre.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Єжов С.М.

Вступ

Кристаллофосфорами прийнято називати широкозонні напівпровідники з високим квантовим виходом люмінесценції. Класичні кінетичні теорії фотолюмінесценції [1 – 3] та фотопровідності [4 – 7] були створені ще 50 років тому і пояснили з фізичної точки зору основні закономірності кінетики люмінесценції та

© Г.В.Весна, А.Ф.Гуменюк, В.Я.Дегода,
Ю.А.Маразуєв, 2015

провідності. Класичні теорії показали вплив пасток на кінетичні залежності та необхідність розглядати систему кінетичних рівнянь, де кожне рівняння описує можливий стан вільних і локалізованих носіїв заряду на пастках та центрах рекомбінації. Причому, кожен доданок в цих рівняннях відображає один із можливих процесів, яких в реальних кристаллофосфорах

налічуються десятки. Тому, велика кількість процесів, які відбуваються одночасно і впливають один на один, і обумовлює складність одержання простих залежностей для концентрацій носіїв на різних центрах. Важливою особливістю класичних теорій є занадто спрощена модель кристалу: один центр рекомбінації та один тип пасток. А експериментально практично для усіх матеріалів спостерігають декілька типів центрів свічення та цілий набір пасток. Тому доцільно розглянути фізично більш адекватну модель кристалофосфору в якій присутні мілкі, фосфоресцентні та глибокі пастки, та одержати розв'язки для концентрацій вільних і локалізованих носіїв заряду в аналітичному вигляді. Очевидно, що одержати точні розв'язки відповідних систем кінетичних рівнянь неможливо, але використовуючи прийняті в класичних теоріях наближення, справедливості яких підтверджена багатьма експериментами, можна одержати прості наближені розв'язки в аналітичному вигляді і для більш складної моделі. А вже маючи кінетичні рівняння для концентрацій носіїв на різних центрах легко одержати залежності для інтенсивності люмінесценції і величини провідності, які можна порівнювати з експериментальними даними. Необхідно зазначити, що одночасний комплексний розгляд люмінесценції і провідності значно збільшує інформативність та достовірність експериментальних результатів.

Модель кристалофосфору

Так як моделі кристалофосфорів з електронним і дірковим механізмами рекомбінації є симетричними для кінетики люмінесценції і провідності, то вибираємо модель з електронним механізмом рекомбінації. Модель кристалофосфору, яка має більш адекватно описувати реальні матеріали, повинна включати (рис. 1): 1) мілкі пастки для електронів; 2) пастки для електронів, які обумовлюють фосфоресценцію (Ф) і релаксацію струму (РС) провідності при цій температурі зразка, а також перший пік термостимульованої люмінесценції (ТСЛ) і термостимульованої провідності (ТСП), далі таку пастку будемо називати фосфоресцентною; 3) глибокі пастки для електронів, тобто такі, з яких відсутня делокалізація електронів при температурі збудження; 4) центри рекомбінації, якими стають

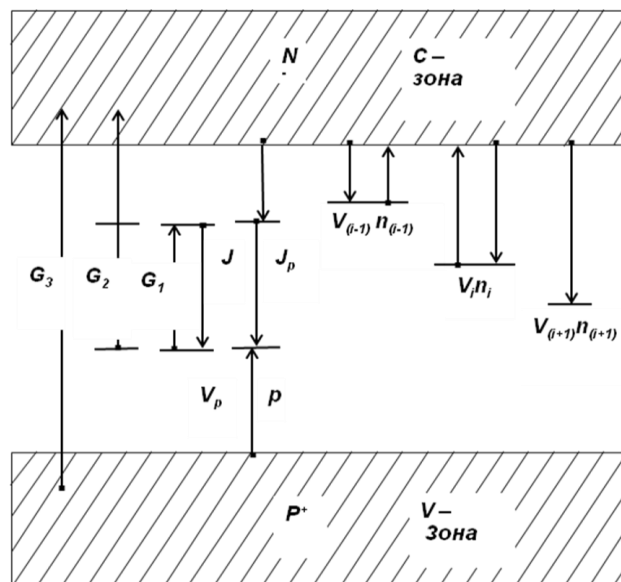


Рис. 1. Схема електронних переходів при збудженні кристалофосфору

глибокі пастки для дірок при локалізації на них дірок (перезаряджені центри свічення). Вважаємо, що відсутня термічна делокалізація дірок з перезаряджених центрів свічення.

Схема можливих переходів для такої моделі кристалофосфору наведена на рис. 1. Очевидно, що після одержання розв'язків для такої моделі, необхідно ще розглянути модель кристалофосфору з двома конкуруючими центрами випромінювальної рекомбінації.

Необхідно пам'ятати, що розподіл пасток на мілкі і глибокі залежить від температури T зразка при якій відбувається збудження. **Мілкими пастками** будемо вважати такі центри локалізації, для яких середній час життя носія заряду в локалізованому стані ($\tau_{(i-1)}$) співмірний або менший за час життя вільного носія в зоні, чи дрейфу носіїв заряду до електричних контактів на зразку. Тобто, $w_{(i-1)} = 1/\tau_{(i-1)} \gg 1 \text{ с}^{-1}$. Локалізація на мілких пастках може суттєво збільшувати реальний час руху носія з моменту його генерації до моменту локалізації чи попадання на електричний контакт. Всю сукупність мілких пасток для електронів та їх параметри будемо позначати індексом $(i-1)$, тобто $v_{(i-1)}$ – концентрація, $\sigma_{(i-1)}^-$ – переріз локалізації, $n_{(i-1)}$ – концентрація локалізованих на них електронів та $w_{(i-1)}$ – імовірність делокалізації електронів з цих пасток. **Фосфоресцентними пастками** будемо називати такі пастки, для яких імовірність делокалізації носія при температурі T

становить $w_i \sim 1 \text{ с}^{-1}$. Саме ці пастки зумовлюють фосфоресценцію і релаксацію струму після припинення збудження. Ці пастки і їх параметри будемо позначати індексом i , тобто v_i (концентрація пасток), σ_i^- (переріз локалізації), n_i (концентрація локалізованих на них електронів) та $w_i \sim 1 \text{ с}^{-1}$ (імовірність делокалізації електронів з цих пасток). **Глибокими пастками** будемо вважати центри локалізації середній час життя носія заряду для яких в локалізованому стані ($\tau_{(i+1)}$) значно перевищує десятки хвилин. Тобто - сумарний час збудження та реєстрації фосфоресценції. Всю сукупність глибоких пасток та їх параметри позначаємо індексом $(i+1)$. Тобто $v_{(i+1)}$ - (концентрація пасток), $\sigma_{(i+1)}^-$ (переріз локалізації), $n_{(i+1)}$ (концентрація локалізованих на них електронів) та $w_{(i+1)}$ (імовірність делокалізації електронів з цих пасток). Для цих пасток виконується умова: $w_{(i+1)} = 1/\tau_{(i+1)} \ll 1 \text{ с}^{-1}$. **Центрами свічення (рекомбінації)** будемо вважати глибокі пастки для дірок, які стають центрами рекомбінації при локалізації на них дірок. Концентрацію перезаряджених центрів рекомбінації позначаємо p , а відповідні параметри центрів позначаємо індексом p : концентрацію центрів v_p , σ_p^+ і σ_p^- - переріз

локалізації вільної дірки та переріз рекомбінації вільного електрона з локалізованою діркою. Також вважаємо що відсутня термічна делокалізація дірок з перезаряджених центрів свічення $w_p \ll 1 \text{ с}^{-1}$.

Локалізація носіїв на мілких пастках та їх розсіювання на усіх пастках, центрах рекомбінації в різних зарядових станах та на будь-яких точкових дефектах, не змінює загальний характер дифузійно-дрейфового руху вільних носіїв. За рахунок розсіювання зменшуються дифузійні і дрейфові параметри руху $D^\pm$ і $\mu^\pm$ вільних носіїв заряду. Але, якщо загальна концентрація точкових дефектів не перевищує 10^{17} см^{-3} , то змінами параметрів $D^\pm$ і $\mu^\pm$ можна нехтувати [8]. При більших концентраціях точкових дефектів рухливості вільних носіїв заряду стають меншими, що впливає лише на величину струму провідності, але не впливає на кінетику процесів люмінесценції, провідності та накопичення зарядів на точкових дефектах.

Загальна система кінетичних рівнянь [9] в наближенні однорідного просторового збудження (усі похідні за просторовими координатами дорівнюють нулю) буде [2, 3]:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial N^-}{\partial t} &= G + [w_{(i-1)}n_{(i-1)} - N^-u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)}] + [w_i n_i - N^-u^- \sigma_i^- (v_i - n_i)] - N^-u^- \sigma_{(i+1)}^- (v_{(i+1)} - n_{(i+1)}) - N^-u^- \sigma_p^- p \\ \frac{\partial n_{(i-1)}}{\partial t} &= N^-u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} - w_{(i-1)}n_{(i-1)} - P^+u^+ \sigma_{(i-1)}^+ n_{(i-1)} \approx N^-u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} - w_{(i-1)}n_{(i-1)} \\ \frac{\partial n_i}{\partial t} &= N^-u^- \sigma_i^- (v_i - n_i) - w_i n_i - P^+u^+ \sigma_i^+ n_i \\ \frac{\partial n_{(i+1)}}{\partial t} &= N^-u^- \sigma_{(i+1)}^- (v_{(i+1)} - n_{(i+1)}) - w_{(i+1)}n_{(i+1)} - P^+u^+ \sigma_{(i+1)}^+ n_{(i+1)} \approx N^-u^- \sigma_{(i+1)}^- (v_{(i+1)} - n_{(i+1)}) - P^+u^+ \sigma_{(i+1)}^+ n_{(i+1)} \\ \frac{\partial P^+}{\partial t} &= G - P^+u^+ \sigma_p^+ (v_p - p) + w_p p - P^+u^+ \sum_j \sigma_j^+ n_j \approx G - P^+u^+ \sigma_p^+ v_p - P^+u^+ \sigma_i^+ n_i - P^+u^+ \sigma_{(i+1)}^+ n_{(i+1)} \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= P^+u^+ \sigma_p^+ (v_p - p) - w_p p - N^-u^- \sigma_p^- p \approx P^+u^+ \sigma_p^+ v_p - N^-u^- \sigma_p^- p \\ p + P^+ &= n_{(i-1)i} + n_{(i+1)} + N^- \end{aligned} \right. \quad (1.1)$$

де: G – темп генерації вільних носіїв (кількість згенерованих вільних носіїв в одиниці об'єму за одиницю часу); N^- та P^+ – концентрації вільних електронів та дірок в зонах, u^- , u^+ – їх теплові швидкості, відповідно; n та p – концентрації локалізованих електронів та дірок на відповідних локальних центрах; v – концентрації пасток та центрів рекомбінації; σ – перерізи локалізації

вільних носіїв заряду (верхній індекс вказує знак заряду вільного носія, а нижній індекс – центр на який відбувається локалізація); w – імовірності термічної делокалізації з локалізованого стану:

$$w_i = w_{0i} \exp(-E_i/kT), \quad (1.2)$$

де: w_{0i} – частотний фактор для цього локального центру; E_i – енергетична глибина пастки; k –

стала Больцмана; T – температура зразка. Слід пам'ятати, що при $T > 0$ усі $w_i > 0$ згідно (1.2), але в залежності від температури ця ймовірність може змінюватись на багато порядків. Саме це дозволяє нехтувати $w_{(i+1)}$ при низьких температурах. На цьому побудована, наприклад, ТСЛ-ретродозиметрія α -кварцу, коли локалізовані носії на глибоких пастках можуть знаходитись тисячі років.

Для одержання розв'язків скористаємося рядом наближень, які використовуються в класичних кінетичних теоріях і підтверджені багатьма експериментальними результатами:

I. Ймовірність локалізації вільної дірки на центр рекомбінації ($P^+u^+\sigma^+v_p$) настільки значна, що час життя вільної дірки у валентній зоні виявляється набагато меншим за час життя вільного електрона. Це справедливо для багатьох кристалофосфорів, оскільки концентрації центрів рекомбінації (в багатьох випадках це є самоактивовані центри) на порядки перевищують концентрації пасток [10]. Це також дозволяє іноді знехтувати ймовірностями рекомбінації вільних дірок з локалізованими на пастках електронами. Справедливість такого припущення для конкретного матеріалу можна перевірити за типом фотопровідності (електронний чи дірковий). Якщо для реального матеріалу маємо фотопровідність p -типу, то необхідно просто поміняти місцями в розрахунках електрони і дірки.

II. Вважаємо, що відсутня делокалізація (як термічна так і оптична) носіїв з глибоких пасток та центрів свічення при температурі збудження кристалофосфору. Це завжди справедливо для термічної делокалізації при низьких температурах, коли ще не спостерігається зовнішнє згасання люмінесценції для центрів свічення і, відповідно, спостерігається ТСЛ при нагріванні. А можливий вплив оптичної делокалізації збуджуючим чи люмінесцентним випромінюванням на накопичення носіїв на пастках будемо розглядати після одержання кінетичних залежностей для концентрацій локалізованих носіїв.

III. Концентрації вільних електронів і дірок залишаються набагато меншими за концентрації локалізованих носіїв (при цьому $N \gg P^+$). Це використовується в класичних кінетичних теоріях фотолюмінесценції [1 – 3] та фотопровідності [4 – 7], в яких також прийнято, що перед початком збудження ($t < 0$) маємо абсолютно спустошені усі локальні центри (усі

пастки є пустими і немає перезаряджених центрів рекомбінації). Цього досягають, як правило, попереднім нагріванням зразка до високих температур без опромінення для висвічування можливої накопиченої світлосуми. Тільки в самий початковий момент збудження ця умова може не виконуватись, але це триває дуже короткий проміжок часу який співмірний з часом життя вільних носіїв у зонах, тобто, набагато менший за 1 секунду. Навіть для низького рівня збудження $G \sim 10^{10} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$ вже наприкінці першої секунди збудження кількість локалізованих носіїв буде на порядки перевищувати кількість вільних носіїв у зонах. Дана умова буде виконуватись і при подальшому збудженні кристалофосфора, а також в процесі Φ і РС та ТСЛ і ТСП. Це дозволяє в кінетичних рівняннях нехтувати концентраціями вільних носіїв у порівнянні з локалізованими.

IV. Ймовірність делокалізації носіїв з мілких пасток ($w_{(i-1)} \gg 1 \text{ с}^{-1}$) настільки велика, що час життя в локалізованому стані ($\tau_{(i-1)} = 1/w_{(i-1)}$) набагато менший за 1 с і, відповідно, електрони практично не акумулюються на цих пастках. Тобто, максимальна (рівноважна) концентрація локалізованих носіїв на мілких пастках набагато менша за концентрацію локалізованих носіїв на фосфоресцентних та глибоких пастках. Просто в кожний момент часу деяка частина нерівноважних електронів перебуває на мілких пастках, що, очевидно, впливає на величину струму провідності.

V. В багатьох кристалофосфорах спостерігається значна концентрація центрів рекомбінації (до 10^{19} - 10^{20} см^{-3}). Тому, як і в класичній кінетичній теорії, будемо вважати, що концентрація центрів рекомбінації значно більша за концентрацію пасток. Це дозволяє нехтувати концентрацією перезаряджених центрів рекомбінації у порівнянні з неперезарядженими ($p \ll v_p$).

Зауважимо, що наведені припущення I–V значно полегшують знаходження розв'язків системи кінетичних рівнянь. В результаті ми одержуємо наближені розв'язки, які необхідні для їх порівняння з експериментальними даними. Але, експериментальні залежності мають похибку, яка для люмінесцентних і електричних досліджень, як правило, становить $\sim 1\%$. Тому, якщо припущення не вносять похибку більшу за 1% та є обґрунтованими з фізичної точки зору, вони будуть правомірними. Ці припущення

дозволяють спростити балансне рівняння системи (1.1) до вигляду:

$$p + P^+ = n_{(i-1)} + n_i + n_{(i+1)} + N^- \Rightarrow p = n_{(i-1)} + n_i + n_{(i+1)} \approx n_i + n_{(i+1)} \quad (1.3)$$

де нехтуємо концентраціями вільних електронів і дірок та концентраціями електронів локалізованих на мілких пастках у порівнянні з концентраціями електронів локалізованих на глибоких пастках та дірок локалізованих на центрах рекомбінації.

В запропонованій моделі кристалофосфору використовуємо тільки один тип мілких і один тип глибоких пасток, що зменшує кількість рівнянь системи (1.1) до семи, причому тільки шість з них є незалежними. Це практично не

обмежує модель, оскільки декілька подібних типів пасток можна об'єднати в одну наступним чином. Для мілких пасток додаємо їх кінетичні рівняння:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{k=1}^{(i-1)} n_k \right) = N^- u^- \sum_{k=1}^{(i-1)} \sigma_k^- v_k - \sum_{k=1}^{(i-1)} w_k n_k \quad (1.4)$$

і проводимо заміну декількох мілких пасток на одну ефективну мілку ($i-1$)-пастку:

$$\sum_{k=1}^{(i-1)} n_k = n_{(i-1)}; \quad \sum_{k=1}^{(i-1)} \sigma_k^- v_k = \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)}, \text{ де: } v_{(i-1)} = \sum_{k=1}^{(i-1)} v_k \text{ та } \sigma_{(i-1)}^- = \frac{\sum_{k=1}^{(i-1)} \sigma_k^- v_k}{\sum_{k=1}^{(i-1)} v_k}; \quad (1.5)$$

$$\sum_{k=1}^{(i-1)} w_k n_k = w_{(i-1)} n_{(i-1)} \text{ де: } w_{(i-1)} = \frac{\sum_{k=1}^{(i-1)} w_k n_k}{\sum_{k=1}^{(i-1)} n_k} = \frac{\sum_{k=1}^{(i-1)} w_k v_k \exp(E_k/kT)}{\sum_{k=1}^{(i-1)} v_k \exp(E_k/kT)}, \quad n_k \sim v_k \exp(E_k/kT)$$

(див. (1.13))

Аналогічно і для глибоких пасток:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} n_k \right) = N^- u^- \sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} \sigma_k^- (v_k - n_k) - P^+ u^+ \sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} \sigma_k^+ n_k \quad (1.6)$$

$$\sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} n_k = n_{(i+1)}; \quad \sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} \sigma_k^- v_k = \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}, \text{ де: } v_{(i+1)} = \sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} v_k \text{ та } \sigma_{(i+1)}^- = \frac{\sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} \sigma_k^- v_k}{\sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} v_k};$$

$$\sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} \sigma_k^+ n_k = \sigma_{(i+1)}^+ n_{(i+1)}, \text{ де: } \sigma_{(i+1)}^+ = \frac{\sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} \sigma_k^+ n_k}{\sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} n_k} = \frac{\sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} \sigma_k^+ v_k}{\sum_{k=(i+1)}^{i_{\max}} v_k} \text{ та } n_k \sim v_k \quad (1.7)$$

Таке об'єднання різних пасток в одну фактично ґрунтується на тому, що перерізи локалізації різних пасток мало відрізняються між собою, в той час як їх концентрації можуть відрізнитися на порядки. При необхідності таку ж процедуру можна зробити і для декількох типів центрів рекомбінації. Але, оскільки для

експериментальних досліджень необхідно мати кінетичні залежності люмінесценції при реєстрації різних центрів свічення, то більш логічно після одержання розв'язків для такої моделі, розглянути модель кристалофосфору з двома конкуруючими центрами випромінювальної рекомбінації.

В цій моделі кристалософору згенерована вільна дірка може тільки локалізуватися на глибокому центрі рекомбінації. В результаті одержуємо перезаряджений центр свічення з локалізованим на ньому вільним електроном і перехід його в збуджений електронний стан. Збуджений центр свічення спонтанно випромінює квант світла і переходить в основний стан – неперезаряджений і незбуджений локальний центр рекомбінації. На відміну від дірки, для вільного електрона в цій моделі є декілька можливостей: 1) локалізуватися і дуже швидко делокалізуватися з мілкої пастки, що не призводить до накопичення світлосуми і не змінює інтенсивність люмінесценції, а лише зменшує струм провідності; 2) локалізуватися на фосфоресцентну чи 3) глибоку пастку; 4) локалізуватися на перезарядженому центрі свічення, тобто прорекомбінувати на локалізованій дірці. Відповідно, ймовірності цих процесів будуть не тільки різними (бо маємо різні концентрації центрів), але також будуть змінюватися їх співвідношення з часом збудження.

Збудження кристалософорові фотонами

Усі види збудження люмінесценції кристалософору з шириною забороненої зони E_g квантами електро-магнітного випромінювання ($h\nu$) можна розділити на чотири типи:

- внутріцентрове (G_1) збудження,
- домішкова іонізація ($h\nu_1 < E_g$) центрів свічення (G_2),
- оптичне зон-зонне збудження ($h\nu_2 > E_g$) (G_3),
- високоенергетичне або рентгенівське ($h\nu_x \gg E_g$) збудження (G_3).

Внутріцентрове збудження кристалософору здійснюється за рахунок оптичного поглинання домішковим центром, при якому відбувається перехід електрона на збуджений рівень цього центру, і відсутня генерація вільних носіїв. Таке збудження не призводить до накопичення світлосуми, отже інтенсивність люмінесценції буде пропорційна інтенсивності збудження, а кінетика визначається спонтанним випромінюванням збуджених центрів. Іонізація центрів свічення при поглинанні оптичного кванту (G_2 на рис. 1) дає вільний електрон в зоні провідності та локалізовану дірку на центрі рекомбінації. При такому збудженні не генеруються вільні дірки і, відповідно, їх рівняння відсутнє в системі кінетичних рівнянь (1.1). При оптичному зон-зонному збудженні (G_3

на рис. 1) один поглинутий квант генерує один вільний електрон і одну вільну дірку. Якщо час життя вільної дірки набагато менший за час життя вільного електрона $\tau_0^+ \ll \tau_0^-$, то вільні дірки швидко локалізуються на центрах рекомбінації, наприклад, за рахунок того, що концентрація центрів рекомбінації значно більша ніж загальна концентрація глибоких пасток. В результаті маємо подібне до випадку G_2 рівняння для локалізованих дірок де фактично постійна величина G_2 замінюється на практично постійний доданок $P^+ u^+ \sigma^+ v_p$. Таким чином, виконання умови $\tau_0^+ \ll \tau_0^-$ майже не змінює систему кінетичних рівнянь для зон-зонного збудження у порівнянні з іонізацією центрів свічення. Також слід зазначити, що при зон-зонному збудженні коефіцієнт поглинання збуджуючого випромінювання перевищує 100 см^{-1} і маємо значну макронеоднорідність збудження по товщині зразка. Усі процеси рекомбінації та накопичення світлосуми будуть відбуватися в приповерхневому шарі зразка. Але необхідно враховувати дифузійний рух вільних носіїв заряду, який буде суттєво зменшувати градієнти концентрацій вільних носіїв і, відповідно, концентрації локалізованих носіїв заряду.

Збудження люмінесценції рентгенівськими чи γ -квантами принципово відрізняється від оптичного зон-зонного збудження, оскільки енергія рентгенівського ($h\nu_x$) чи γ -кванта на багато порядків перевищує ширину забороненої зони. Наслідком цього є генерація тисяч вільних електронно-діркових пар при фотопоглинанні одного рентгенівського кванту в невеликому об'ємі. Кількість вільних пар Π_0 можна оцінити за допомогою простого співвідношення [11,12]: $\Pi_0 = h\nu_x / (2.5 \div 3) E_g$; а радіус області генерації

визначається [13]: $r_g = \frac{6\pi \varepsilon_0^2 \sqrt{E_g} (h\nu_x)^3}{e^4 n \ln(h\nu_x / 3E_g)}$ (де n –

загальна концентрація електронів у кристалософорі). Для багатьох матеріалів значення r_g при поглинанні квантів $10 \div 50 \text{ keV}$ становить десятки нанометрів. Відповідно, максимальна концентрація згенерованих вільних носіїв досягає значень

$N_{\max}^- = P_{\max}^+ = 3\Pi_0 / 4\pi r_g^3 \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Фактично, при рентгенівському збудженні маємо не тільки макронеоднорідність збудження, обумовлену поглинанням рентгенівського випромінювання, а й просторову мікронеоднорідність генерації вільних носіїв заряду. Але, за рахунок швидкої

рекомбінації в центральній частині області генерації, яка забезпечує основний внесок у сцинтиляцію, і при тривалому збудженні одержуємо достатньо однорідне накопичення світлосуми на глибоких пастках. Таким чином, для тривалого рентгенівського збудження можна застосовувати кінетичні рівняння, отримані за умови однорідного збудження. Фактично, стаціонарні розв'язки будуть справедливими як для рентгенівського так і γ -збудження кристалофосфорів. Необхідно відзначити ще одну важливу особливість рентгенівського збудження – значно менша висвічуюча дія рентгенівського опромінення. Оптичне збудження може поглинатись не тільки домішковими центрами рекомбінації чи матрицею кристалофосфора, а й локалізованими носіями на пастках, при досить великому їх накопиченні. Саме оптичне висвічування обмежує накопичення світлосуми при оптичному збудженні, що, згідно [2,3], призводить до незначного заповнення глибоких пасток при тривалому оптичному збудженні.

Навіть з усіма вказаними припущеннями, система кінетичних рівнянь залишається все ще надто складною для одержання розв'язків в аналітичному вигляді. Тому логічно: спочатку знайти розв'язки для стаціонарних станів для спрощеної моделі кристалофосфору (не враховуються деякі процеси, наприклад, термічна

та оптична делокалізація носіїв з локальних центрів), коли система диференціальних рівнянь переходить в систему алгебраїчних рівнянь. А потім знаходити кінетичні залежності, послідовно ускладнюючи модель, наближаючи її до реальних матеріалів.

Накопичення носіїв на мілких пастках

В загальному випадку процес накопичення носіїв на різних центрах логічно розділити за часом на два етапи: 1) короткотривалий (перші декілька секунд), коли відбувається зміна концентрації вільних електронів в зоні провідності та концентрації локалізованих електронів на мілких пастках від нуля до свого стаціонарного значення при постійному збудженні; та 2) довготривалий – накопичення електронів на фосфоресцентній і глибоких пастках та дірок на центрах рекомбінації. Тривалість другого етапу може досягати годин, в залежності від інтенсивності збуджуючого випромінювання.

Для визначення кінетики першого етапу, тобто встановлення $N(t)$, $P^+(t)$ та $n_{(i-1)}(t)$, можна суттєво спростити систему рівнянь (1.1), оскільки за перші секунди збудження концентрації локалізованих носіїв будуть залишатися набагато меншими за концентрації відповідних центрів ($p \ll v_p$, $n_i \ll v_i$, $n_{(i+1)} \ll v_{(i+1)}$):

$$\begin{cases} \frac{\partial N^-}{\partial t} = G + [w_{(i-1)}n_{(i-1)} - N^-u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)}] - N^-u^- [\sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}] \\ \frac{\partial n_{(i-1)}}{\partial t} = N^-u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} - w_{(i-1)}n_{(i-1)} \\ \frac{\partial P^+}{\partial t} = G - P^+u^+ \sigma_p^+ v_p \end{cases} \quad (1.8)$$

Спочатку знайдемо стаціонарні розв'язки при $t > 1$ с, коли похідні по часу для цієї системи

рівнянь дорівнюють нулю. Для концентрацій вільних електронів і дірок маємо:

$$0 = G + [w_{(i-1)}n_{(i-1)} - N^-u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)}] - N^-u^- [\sigma_i^- (v_i - n_i) + \sigma_{(i+1)}^- (v_{(i+1)} - n_{(i+1)})] - N^-u^- \sigma_p^- p$$

$$N_0^- = \frac{G}{u^- [\sigma_i^- (v_i - n_i) + \sigma_{(i+1)}^- (v_{(i+1)} - n_{(i+1)}) + \sigma_p^- p]} = \frac{G}{u^- [\sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)} - (\sigma_i^- n_i + \sigma_{(i+1)}^- n_{(i+1)} - \sigma_p^- p)]} = G\tau^- \quad (1.9)$$

$$0 = G - P^+u^+ \sigma_p^+ (v_p - p) \Rightarrow P^+ = \frac{G}{u^+ \sigma_p^+ (v_p - p)} = G\tau^+ \quad (1.10)$$

де: τ^- і τ^+ – час життя вільного електрона в зоні провідності та дірки у валентній зоні відповідно. Цей час визначається тим, як швидко вільний носій заряду зустрінеться з центром локалізації.

Відповідно, цей час життя носіїв у вільному стані в процесі збудження буде змінюватись, оскільки під час збудження концентрації n_i , $n_{(i+1)}$, p змінюються від нуля до свого максимального

значення. Але, повинно виконуватись балансне рівняння для локалізованих носіїв (1.3) та можна знехтувати концентраціями локалізованих електронів і дірок на глибоких центрах на початковому етапі збудження, тобто буде виконуватись співвідношення: $(\sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}) \gg (\sigma_i^- n_i + \sigma_{(i+1)}^- n_{(i+1)} - \sigma_p^- p)$. Це означає, що зміни τ^- та τ^+ будуть незначними в процесі збудження кристалофосфору і можна використовувати їх постійні значення:

$$\tau_0^- = \frac{1}{u^- (\sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)})}; \quad \tau_0^+ = \frac{1}{u^+ \sigma_p^+ v_p} \quad (1.11)$$

Незмінність параметрів τ_0^- та τ_0^+ також означає, що при цьому фактично не змінюються загальні довжини пробігів вільних електронів і дірок.

З рівняння для локалізованих електронів на мілких пастках одержуємо їх рівноважну концентрацію:

$$\frac{\partial n_{(i-1)}}{\partial t} = N^- u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} - w_{(i-1)} n_{(i-1)} = 0 \Rightarrow \frac{n_{0(i-1)}}{v_{(i-1)}} = \frac{N_0^- u^- \sigma_{(i-1)}^-}{w_{(i-1)}} \ll 1 \quad (1.12)$$

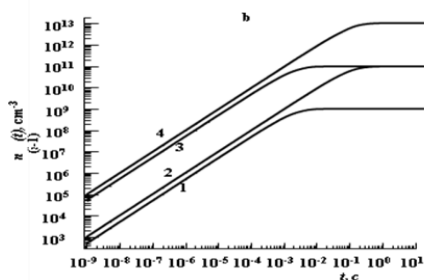
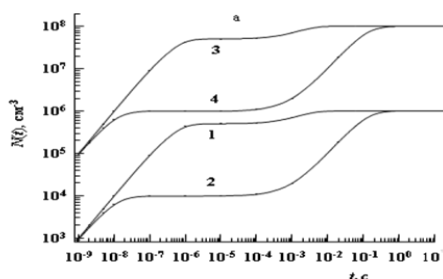


Рис. 2. Розраховані кінетичні залежності концентрацій електронів вільних (а) та локалізованих на мілких пастках (б) при інтенсивностях збудження $G = 10^{12}$ (1, 2) та $10^{14} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ (3,4) для концентрацій мілких пасток $v_{(i-1)} = 10^{15}$ (1,3) та 10^{17} cm^{-3} (2, 4) при $\tau_0^- = 10^{-6} \text{ s}$

Використовуючи u^- відоме співвідношення між перерізом локалізації електрона на пастках $\sigma_{(i-1)}^-$ та частотним фактором $w_{0(i-1)}$ делокалізації з цієї пастки [4]: $\frac{w_{0(i-1)}}{u^- \sigma_{(i-1)}^-} = N_C$ де: $N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$

– ефективна густина станів для електронів у зоні провідності, одержуємо співвідношення для стаціонарної концентрації локалізованих електронів на мілкій пастці (i-1)-го типу:

$$\frac{n_{0(i-1)}}{v_{(i-1)}} = \frac{N_0^-}{N_C} \exp\left(\frac{E_{(i-1)}}{kT}\right) \quad (1.13)$$

Можна оцінити це співвідношення (1.13), наприклад для кристалів ZnSe, використовуючи одержані експериментальні значення: перша мілка пастка при $T = 85 \text{ K}$ має $E_{(i-1)} = 0,115 \text{ eV}$ і температурне положення відповідного піку ТСЛ становить $T_m = 61 \text{ K}$. Це означає, що при 85 K та $N_0^- = 10^6 \text{ cm}^{-3}$ рівень заповнення цієї мілкої пастки буде: $n_{0(i-1)}/v_{(i-1)} < 10^{-3}$. А для інших, ще більш мілких пасток рівень заповнення при цій температурі буде ще менший. Таким чином, припущення IV є обґрунтованим і дозволяє при розв'язанні системи кінетичних рівнянь (1.1) нехтувати концентрацією електронів локалізованих на усіх мілких пастках для люмінесценції. Слід пам'ятати, що величина струму провідності пропорційна тільки концентрації вільних носіїв в даний момент часу. Носії заряду які знаходяться на мілких пастках не беруть участі в провідності. Пропорційність між $n_{0(i-1)}$ та N_0^- (1.13) дозволяє визначити коефіцієнт ($a_{(i-1)}$) для концентрації вільних носіїв, які обумовлюють величину струму провідності:

$$a_{(i-1)} = \frac{N_0^-}{N_0^- + n_{0(i-1)}} = \frac{1}{1 + \frac{v_{(i-1)}}{N_C} \exp\left(\frac{E_{(i-1)}}{kT}\right)} \quad (1.14)$$

Фактично цей коефіцієнт характеризує зменшення струму провідності за рахунок

короткочасної локалізації вільних носіїв на мілких пастках.

Маючи стаціонарні значення концентрацій переходимо до визначення функціональних залежностей для концентрацій вільних носіїв у зонах та локалізованих на мілких пастках. При вмиканні збудження концентрації вільних носіїв заряду у зонах будуть набувати стаціонарних значень не миттєво, а за деякий досить короткий час. Для концентрації вільних дірок у валентній зоні одержуємо простий розв'язок третього рівняння системи (1.8):

$$P^+(t) = G\tau_0^+ \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_0^+}\right) \right] \quad (1.15)$$

Концентрація вільних дірок досягає свого стаціонарного значення за експоненціальним законом з постійною часу, яка визначається концентрацією пасток для дірок (тобто, концентрацією центрів рекомбінації). При цьому

стаціонарна концентрація вільних дірок пропорційна інтенсивності збуджуючого випромінювання. Оцінка постійної часу дає, що при $v_p > 10^{17} \text{ см}^{-3}$ та звичайних параметрах цих центрів маємо $\tau_0^+ < 10^{-8} \text{ с}$.

Для концентрації вільних електронів час встановлення стаціонарного значення визначається концентрацією мілких пасток. Для визначення залежностей $N^-(t)$ та $n_{(i-1)}(t)$, які повинні задовольняти перші два рівняння системи (1.8), визначимо з першого рівняння $n_{(i-1)} =$

$$= \frac{1}{w_{(i-1)}} \left[\frac{\partial N^-}{\partial t} + N^- u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + N^- u^- \sigma_i^- v_i + N^- u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)} - G \right] \quad (1.16)$$

та підставляємо його в кінетичне рівняння для мілких пасток. В результаті одержуємо рівняння для однієї змінної $N^-(t)$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{w_{(i-1)}} \frac{d}{dt} \left(\frac{dN^-}{dt} + N^- u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + N^- u^- \sigma_i^- v_i + N^- u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)} - G \right) = \\ & = N^- u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} - \frac{dN^-}{dt} - N^- u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} - N^- u^- \sigma_i^- v_i - N^- u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)} + G \\ & \frac{1}{w_{(i-1)}} \frac{d^2 N^-}{dt^2} + \frac{(w_{(i-1)} + u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)})}{w_{(i-1)}} \frac{dN^-}{dt} + N^- (u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}) - G = 0 \end{aligned} \quad (1.17)$$

Розв'язок цього рівняння шукаємо у вигляді:

$N^-(t) = N_0^- [1 - \exp(-t/\tau)]$. В результаті одержуємо систему з двох алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases} N_0^- u^- (\sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}) = G \Rightarrow \\ N_0^- = \frac{G}{u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}} = G\tau_0^- \\ -\frac{1}{\tau^2} + \frac{1}{\tau} (w_{(i-1)} + u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}) \\ -w_{(i-1)} (u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}) = 0 \end{cases}$$

Перше рівняння дає стаціонарне значення концентрації вільних носіїв, яке співпадає з (1.9), а друге – квадратичне рівняння для постійної часу. Розв'язок цього рівняння дає два дійсні корені:

$$\left(\frac{1}{\tau} \right)_{1,2} = \frac{1}{2} (w_{(i-1)} + u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}) \pm$$

$$\pm \frac{1}{2} \sqrt{(w_{(i-1)} + u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)})^2 - 4w_{(i-1)} (u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)})}$$

Враховуючи, що

$$4w_{(i-1)} \ll (w_{(i-1)} + u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}) \text{ та } (u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}) < (w_{(i-1)} + u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}),$$

(тобто, під коренем перший доданок значно більший за другий) спростуємо вирази для $(1/\tau)_{1,2}$ і одержуємо дві постійні часу – швидка τ_R та повільна τ_S :

$$\frac{1}{\tau_R} = \left(u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)} \right)$$

$$\frac{1}{\tau_S} = \frac{w_{(i-1)} \left(u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)} \right)}{\left(w_{(i-1)} + u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)} \right)} \quad (1.18)$$

Загальний розв'язок для $N(t)$ буде лінійною комбінацією двох експонент

$$N^-(t) = \frac{G \left[1 - \exp(-t/\tau_R) \right]}{u^- (\sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + \sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)})} + \frac{G \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} \left[1 - \exp(-t/\tau_S) \right]}{u^- (\sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)}) (\sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + \sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)})} \quad (1.19)$$

Таким чином, збільшення концентрації вільних електронів від нуля до стаціонарного значення описується сумою двох експонент, тобто монотонною функцією разом зі своїми похідними. Для прикладу на рис. 2а наведені розраховані залежності для $N(t)$ при двох різних

$$N^-(t) = N_{0R}^- \left[1 - \exp(-t/\tau_R) \right] + N_{0S}^- \left[1 - \exp(-t/\tau_S) \right],$$

причому $N_0^- = N_{0R}^- + N_{0S}^-$.

З фізичної точки зору є зрозумілим, що в момент початку збудження мілка пастка нічим не відрізняється від глибокої. Тому в першому рівнянні системи (1.8) для вільних носіїв можна знехтувати доданком $w_{(i-1)} n_{(i-1)}$ і одержати його

$$\text{розв'язок: } N^-(t) = \frac{G \left[1 - \exp(-t/\tau_R) \right]}{u^- (\sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + \sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)})}.$$

Тому, загальний розв'язок для $N(t)$ буде:

інтенсивностях збудження ($G = 10^{12}$ та $10^{14} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$) і двох концентраціях мілких пасток ($v_{(i-1)} = 10^{15}$ та 10^{17} см^{-3}).

Щоб отримати $n_{(i-1)}(t)$ необхідно одержану залежність для $N(t)$ (1.19) підставити в (1.16):

$$n_{(i-1)} = \frac{1}{w_{(i-1)}} \left[\frac{\partial N^-}{\partial t} + N^- u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + N^- u^- \sigma_i^- v_i + N^- u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)} - G \right] =$$

$$= \left[\frac{(N_{0R}^- + N_{0S}^-)}{w_{(i-1)} \tau_R} + \frac{(N_{0R}^- + N_{0S}^-)}{w_{(i-1)} \tau_0} \right] + \left[\frac{N_{0R}^-}{w_{(i-1)} \tau_R} - \frac{N_{0R}^-}{w_{(i-1)} \tau_R} \right] \exp\left(-\frac{t}{\tau_R}\right) + \left[\frac{N_{0S}^-}{w_{(i-1)} \tau_S} - \frac{N_{0S}^-}{w_{(i-1)} \tau_R} \right] \exp\left(-\frac{t}{\tau_S}\right) =$$

$$= \frac{N_0^- \cdot u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)}}{w_{(i-1)}} + 0 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_R}\right) -$$

$$- \frac{N_0^- \cdot \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)}}{(\sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + \sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)})} \left[\frac{(u^- \sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + u^- \sigma_i^- v_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)})}{w_{(i-1)}} - \frac{(\sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)})}{(\sigma_{(i-1)}^- v_{(i-1)} + \sigma_i^- v_i + \sigma_{(i+1)}^- v_{(i+1)})} \right] \exp\left(-\frac{t}{\tau_S}\right)$$

Таким чином, кінетика накопичення електронів на мілких пастках описується однією експонентою:

$$n_{(i-1)}(t) = n_{0(i-1)} \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_S}\right) \right] \quad (1.20)$$

З фізичної точки зору це цілком логічно, що заповнення мілких пасток описується тільки повільною експонентою. На рис. 2b наведені розраховані залежності $n_{(i-1)}(t)$ при тих же умовах що і $N(t)$ (при двох різних інтенсивностях збудження і двох концентраціях мілких пасток.

Необхідно зазначити, що постійна часу τ_S визначається не тільки ймовірністю делокалізації з мілкої пастки, а й співвідношенням концентрацій мілких і глибоких пасток.

Одержані співвідношення для концентрацій носіїв $P^+(t)$ (1.15), $N(t)$ (1.19), $n_{(i-1)}(t)$ (1.20) даної моделі дозволяють записати ці концентрації і для більш широкої моделі кристалофосфора. Так врахування мілких пасток для дірок (v_j) та додаткового конкуруючого каналу рекомбінації (v_{p2}) дає для вільних і локалізованих дірок:

$$\tau_0^+ = \frac{1}{u^+(\sigma_1^+ \nu_{p1} + \sigma_2^+ \nu_{p2})}, \quad \frac{1}{\tau_R^+} = (u^+ \sigma_j^+ \nu_j + u^+ \sigma_{p1}^+ \nu_{p1} + u^+ \sigma_{p2}^+ \nu_{p2}), \quad \frac{1}{\tau_S^+} = \frac{w_j(u^+ \sigma_{p1}^+ \nu_{p1} + u^+ \sigma_{p2}^+ \nu_{p2})}{(w_j + u^+ \sigma_j^+ \nu_j + u^+ \sigma_{p1}^+ \nu_{p1} + u^+ \sigma_{p2}^+ \nu_{p2})},$$

$$P^+(t) = G\tau_0^+ \left(\frac{\sigma_{p1}^+ \nu_{p1} + \sigma_{p2}^+ \nu_{p2}}{\sigma_j^+ \nu_j + \sigma_{p1}^+ \nu_{p1} + \sigma_{p2}^+ \nu_{p2}} \right) \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_R^+}\right) \right] + G\tau_0^+ \left(\frac{\sigma_j^+ \nu_j}{\sigma_j^+ \nu_j + \sigma_{p1}^+ \nu_{p1} + \sigma_{p2}^+ \nu_{p2}} \right) \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_S^+}\right) \right],$$

$$P_0^+ = G\tau_0^+, \quad \frac{n_{0j}}{\nu_j} = \frac{P_0^+}{N_V} \exp\left(\frac{E_j}{kT}\right), \quad n_j(t) = n_{0j} \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_S^+}\right) \right], \quad (1.21)$$

а залежності для вільних і локалізованих електронів залишаються незмінними. Також цю модель можна розширити на випадок наявності в матеріалі декількох типів мілких пасток

($k = 1, \dots, (i-1)$). Для концентрацій вільних і локалізованих на мілких пастках електронів можна записати відповідні постійні часу та концентрації:

$$\tau_0^- = \frac{1}{u^-(\sigma_i^- \nu_i + \sigma_{(i+1)}^- \nu_{(i+1)})}, \quad \frac{1}{\tau_R^-} = \left(u^- \sigma_i^- \nu_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- \nu_{(i+1)} + u^- \sum_{k=1}^{(i-1)} \sigma_k^- \nu_k \right), \quad \frac{1}{\tau_{Sk}^-} = \frac{w_k(u^- \sigma_i^- \nu_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- \nu_{(i+1)})}{\left(w_k + u^- \sum_{k=1}^{(i-1)} \sigma_k^- \nu_k + u^- \sigma_i^- \nu_i + u^- \sigma_{(i+1)}^- \nu_{(i+1)} \right)},$$

$$N^-(t) = G\tau_0^- \frac{(\sigma_i^- \nu_i + \sigma_{(i+1)}^- \nu_{(i+1)}) \cdot [1 - \exp(-t/\tau_R^-)]}{\left(\sum_{k=1}^{(i-1)} \sigma_k^- \nu_k + \sigma_i^- \nu_i + \sigma_{(i+1)}^- \nu_{(i+1)} \right)} + G\tau_0^- \cdot \sum_{k=1}^{(i-1)} \frac{\sigma_k^- \nu_k \cdot [1 - \exp(-t/\tau_{Sk}^-)]}{\left(\sum_{k=1}^{(i-1)} \sigma_k^- \nu_k + \sigma_i^- \nu_i + \sigma_{(i+1)}^- \nu_{(i+1)} \right)},$$

$$N_0^- = G\tau_0^-, \quad \frac{n_{0k}}{\nu_k} = \frac{N_0^-}{N_C} \exp\left(\frac{E_k}{kT}\right), \quad n_k(t) = n_{0k} \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_{Sk}^-}\right) \right] \quad (1.22)$$

Таким чином, в цьому випадку кінетика концентрації вільних електронів буде визначатися кількістю типів мілких пасток, тобто сумою з $(i-1+1)$ -експонент. Важливою особливістю для накопичення носіїв на мілких пастках є те, що τ_R , τ_{Sk} і τ_0^- не залежать від інтенсивності збудження (G).

Оптична делокалізація електронів з мілких пасток за рахунок оптичного поглинання збуджуючих і люмінесцентних квантів буде конкурувати з інтенсивною термічною делокалізацією електронів. Фактично дещо збільшуватиметься параметр $w_{(i-1)}$, що принципово не впливає на кінетику концентрацій вільних і локалізованих на мілких пастках носіїв.

Висновки

Одержані залежності для концентрацій вільних і локалізованих на мілких пастках носіїв заряду при вмиканні збудження. Встановлено, що мілкі пастки суттєво не впливають на стаціонарну рекомбінаційну люмінесценцію, оскільки не змінюють час життя вільних електронів в зоні провідності, проте суттєво впливають на величину струму провідності,

оскільки частина вільних електронів постійно локалізована на пастках. Також встановлено значний вплив мілких пасток на частотні характеристики люмінесценції та провідності при використанні модуляції збуджуючого випромінювання.

Важливою особливістю для накопичення носіїв на мілких пастках є те що форма кривих для концентрацій носіїв $n_k(t)/n_{0k}$ та $N(t)/N_0$ однакова при різних інтенсивностях збудження. При різних інтенсивностях генерації вільних носіїв в різних шарах зразка на різній глибині від опромінювальної поверхні, темп перезарядки мілких пасток однаковий. Тобто, неоднорідне збудження зразка не впливає на форму кривих розгоряння фотолюмінесценції і фотопровідності, а інтенсивність люмінесценції і величина струму провідності пропорційні інтенсивності збуджуючого випромінювання.

Список використаних джерел

1. Адирович Э. И. Некоторые вопросы теории люминесценции кристаллов / Э. Адирович.- Москва: ГИТТЛ, 1956.- 350 с.
2. Фок М.В. Введение в кинетику люминесценции кристаллофосфоров / М.Фок.- Москва: Наука, 1964.- 284 с.
3. Антонов-Романовский В.В. Кинетика фотолюминесценции кристаллофосфоров / В. Антонов-Романовский - Москва: Наука, 1966. – 323 с.
4. Бьюб Р. Фотопроводимость твердых тел / Р.Бьюб - Москва: Из-во ИЛ, 1962. -558 с.
5. Рывкин С.М. Фотоэлектрические явления в полупроводниках / С.Рывкин.- Москва: ГИФМЛ, 1963.- 494 с.
6. Роуз А. Основы теории фотопроводимости / А. Роуз.- Москва: Мир.- 1966.- 192 с.
7. Лашкарев В.Е., Неравновесные процессы в фотопроводниках / В.Лашкарев, А.Любченко, М.Шейнкман.- Киев: Наукова думка, 1981.- 264 с.
8. Амброзяк А. Конструкция и технология полупроводниковых фотоэлектрических приборов / А.Амброзяк - Москва: Советское радио, 1970.- 392 с.
9. Дегода В.Я. Узагальнене кінетичне рівняння рекомбінаційної люмінесценції кристаллофосфорів /В. Дегода Наукові записки Київського національного університету, т. XI, 2004, с.255-261
10. Гурвич А.М. Введение в физическую химию кристаллофосфоров / А. Гурвич.- Москва: Высшая школа, 1982.- 376 с.
11. Гурвич А. М. Рентгенолюминофоры и рентгеновские экраны / А.Гурвич - Москва: Атомиздат, 1976.- 153 с.
12. Алукер Э. Электронные возбуждения и радиолюминесценция щелочно-галогидных кристаллов / Э.Алукер, Д.Лусис, С.Чернов - Рига: "Зинатне", 1979.- 252 с.
13. Дегода В.Я., Просторова генерація електронних збуджень при поглинанні рентгенівського кванта / В.Дегода, А.Софієнко УФЖ.- 2007.- т.52, № 3.-с.256-264.

References

1. ADIROVICH E.I. (1956) *Some questions in the theory of luminescence of crystals*. Moskva: GITTL.
2. FOK M.V. (1964) *Introduction to the kinetics of luminescence of crystal*. Moskva: Nauka.
3. ANTONOV-ROMANOVSKIY V.V. (1966) *The kinetics of the photoluminescence of crystal*. Moskva: Nauka.
4. BUBE R. (1960) *Photoconductivity of solids*. New York – London.
5. RIVKIN S.M. (1963) *Photoelectric phenomena in semiconductors*. Moskva: GIFML.
6. ROUS A. (1966) *Basic theory of photoconductivity*. Moskva: Mir.
7. LASHKAREV V.E., LUBCHENKO A. and SHEINKMAN M. (1981) *Non-equilibrium processes in photoconductors*. Kiev: Naukova dumka.
8. AMBROZAYK A. (1970) *The design and technology of semiconductor photovoltaic devices*. Moskva: Sovetskoe radio.
9. DEGODA V.Y. (2004) Generalized kinetic equation recombination luminescence crystal phosphors. *Scientific notes Kyiv National University*. XI.
10. GURVICH A.M. (1982) *Introduction to the physical chemistry of crystal*. Moskva: Vicshay shkola.
11. GURVICH A.M. (1976) *X-ray lyuminofory and X-ray screens*. Moskva: Atomizdat.
12. ALUKER E., LUSIS D. and CHERNOV S. (1979) *Electronic excitation and radioluminescence alkali halide crystals*. Riga: Zinatne.
13. DEGODA V. and SOFIENKO A. (2007) Spatial generation of electronic excitations in the absorption of X-rays. *UJP*.52(3).p.256-264.

Надійшла до редколегії 18.09.15

УДК 538.958.

Закіров М. І.¹, асп.,
Свеженцова К. В.², к.ф.-м.н.,
Коротченков О. О.¹, д.ф.-м.н.

Люмінесценція порошків ZnO, отриманих під дією ультразвуку

¹Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13; e-mail: zakurov@gmail.com

²Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є.
Лашкарьова НАН України, 03028, Україна,
Київ, просп. Науки 41

M. Zakirov¹, PhD stud.,
K. Svezhentsova², PhD.,
O. Korotchenkov¹, Dr. Sci.

Luminescence of ZnO powders grown in ultrasonic fields

¹Taras Shevchenko Kiev National University 01601,
Kyiv, Volodymyrska st. 64/13
e-mail: zakurov@gmail.com

²V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics,
NAS of Ukraine, 41 pr. Nauki, 03028, Kyiv, Ukraine

Нанорозмірні порошки оксиду цинку синтезовано гідротермальним та сонохімічним методами, використовуючи реакцію ацетату цинку та гідрооксиду натрію в середовищі ізопропілового спирту. Досліджено зміну інтегральної інтенсивності фотолюмінесценції (ФЛ) та напівширини піку у видимому діапазоні, як функції від часу проведення синтезу. Відмічено покращення люмінесцентних властивостей ZnO, отриманого сонохімічним методом в порівнянні із гідротермальним синтезом, при малих тривалостях реакції. Відмічено різний характер зміни напівширини піку ФЛ для різних методів синтезу. При сонохімічному синтезі спостерігається об'єднання окремих наночастинок у мікроскопічні агрегати.

Ключові слова: оксид цинку, сонохімічний синтез, інтегральна інтенсивність, фотолюмінесценція.

Nanosized ZnO powders were synthesis by hydrothermal and sonochemical reaction. Reaction were held in 2-propanol environ using zinc acetate and sodium hydroxide as precursors. All synthesized samples demonstrate strong photoluminescence (PL) in visible region by excitation of UV light. Study of PL shows variations of the integrated (PL) intensity and full width at half maximum of the emission band were found to depend on the reaction time. It is noted that the optical properties of ZnO can be improved by employing sonochemical reactions. Changes of the PL full width at half maximum have different character for both synthesis methods. A possible mechanism is proposed to explain the changes in optical properties. The morphology and structure of ZnO have been characterized using atomic force microscopy (AFM). Single nanoparticles obtained by sonochemical synthesis are grouped into microscopic aggregates.

Key Words: zinc oxide, sonohimichnyy synthesis, integrated intensity, photoluminescence.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Introduction

Zinc oxide (ZnO) is an important semiconductor material with a band gap of 3.37 eV and exciton binding energy of 60 meV. High thermal and chemical stability, simple tunability of the optical and electrical properties are widely applicable in opto-electric devices [1–3]. Properties of ZnO strongly depend on the morphology, size and crystal structure [4,5]. Due to these features, zinc oxide is widely used in various areas, such as photocatalysts, chemical, gas and biosensors, solar cells, opto- and microelectronics [6–13]. Furthermore, due to its piezoelectric properties, ZnO is an important

acoustoelectronic material utilizing bulk and surface acoustic waves (filters, resonators, delay lines) [14].

Since the morphology and defect content determine opto-electrical properties of ZnO [5] various methods of producing zinc oxide has been developed. In recent years, nano- and micro-sized ZnO materials were obtained using various methods. For example, sputter deposition was used to get ZnO nanorods placed on the Cu/Ti/Si and having an average diameter of 40 nm [15], thermal evaporation produced needle-like ZnO rods, nanoribbons [16], sol-gel reaction yields nanocrystalline ZnO powders as small as about 25 nm in diameter [17], using different solvents, flower-, snowflake-, prism-,

pricklysphere- and rodlike samples were grown from solutions with different pH [18]. These samples typically exhibit emission of light in the spectral range from 385 to 510 nm. Furthermore, different precursors, such as $\text{Zn}(\text{OH})_4^{2-}$ [19], $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ [20], were successfully used in hydrothermal synthesis to produce nanorods with different ratios of length to diameter.

Despite these methods have several properties that are advantageous for growth of ZnO materials, there has been a number of impediments for their widespread adoption. These are high temperatures and pressures, toxic reagents, long reaction times, the need to add stabilizers, etc. Today, the synthesis of nanoscale materials under microwave irradiation and during sonochemical reactions become particularly attractive [19–25].

Sonochemical reaction results from acoustic cavitation, which is accompanied by the formation, growth and collapse of cavitation bubbles. Due to the collapse, extreme physical and chemical conditions are formed inside the bubble. Therefore, chemical cavitation effects strongly depend on the content of cavitating bubbles and, hence, the choice of a proper solvent. For example, to minimize the participation of the solvent vapour and to maximize the vapor temperature in the collapsing bubble, hydrocarbon solvents with high boiling point are usually used [25–27].

In this work, we propose to use zinc acetate and sodium hydroxide as precursors and isopropyl alcohol (2-propanol) as a solvent in sonochemically producing ZnO and show that the resulting ZnO powder exhibits competitive luminescence performance.

Experimental

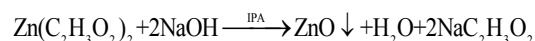
Two routes of chemical reactions were used here, allowing to produce ZnO powders by hydrothermal and sonochemical synthesis. Isopropyl alcohol (2-propanol) was used as a solvent because it has fairly high boiling temperature of 82.4°C. The reaction was achieved using 2-propanol (99.99%), zinc acetate and sodium hydroxide. We first prepared a solution of ZnAc in 2-propanol (solution 1) and sodium hydroxide in 2-propanol (solution 2), which was cooled down to 0°C.

At hydrothermal synthesis, these solutions (1 and 2) were mixed and heated to 65°C. They were then stored at this temperature for more or less prolonged stirring. At time instants (t) of 1, 30, 60 and 120 minutes, the samples grown in chemical reactions were taken. The resulting powders (white in color) were

dried and washed in distilled water and methanol. They were then again dissolved in 2-propanol.

For sonochemical synthesis, the above solutions (1 and 2) were mixed at room temperature and placed in sonochemical reactor. The details of our sonochemical bath were given elsewhere [28]. During the sonoactivation of the solution, the temperature raised to about 80°C, which was due to absorption of the ultrasonic power in the solution.

In both chemical and sonochemical reactions, the synthesis of ZnO was achieved in the chemical reaction of the following type:



where, $\text{Zn}(\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2)_2$ is the zinc acetate, NaOH is the sodium hydroxide, IPA is the 2-propanol and $\text{NaC}_2\text{H}_3\text{O}_2$ is the sodium acetate.

Photoluminescence (PL) spectra were excited using an N_2 laser with the wavelength $\lambda=337.2$ nm and repetition frequency 100 Hz. PL was dispersed by a DMR-4 monochromator and sensed by a FEU-79 photomultiplier tube.

The powder size and the roughness of particle's surface were observed by Atomic force microscopy (AFM) FemtoScan Online. Scanning was conducted in the contact mode in ambient air using the fpN10S cantilever (radius of curvature of the tip was ≈ 10 nm).

Results and Discussion

In contrast to the chemical route, which results in a micron-sized ZnO powder, sonochemical reactions produce a mixture of μm - and nm-sized grains. The size and shape distributions of the sonochemically synthesized particles are exemplified in Fig. 1. It is found that the particles have nearly spherical shape, and smaller ones are collected into larger agglomerates. Single particles are not more than about 500 nm in diameter. Importantly, the particles exhibit good reproducibility in size,

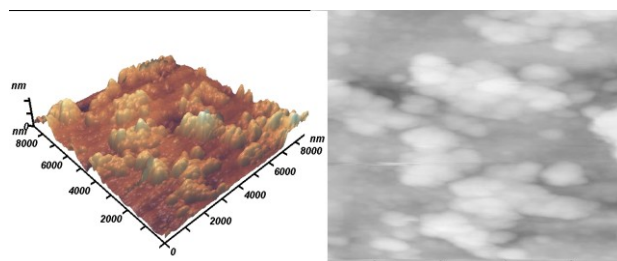


Fig. 1. AFM images (3D-, left, and 2D-, right, pictures) of the sonochemically synthesized nm-sized ZnO powder.

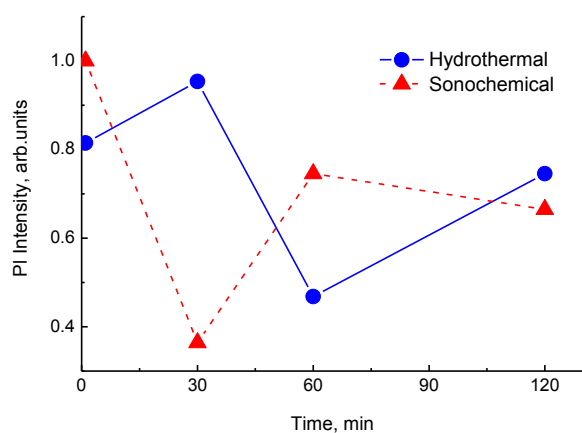


Fig. 2. Integrated intensity of the yellow emission band vs stirring time for hydrothermal (circles, solid lines) and sonochemical (triangles, dashed lines) synthesis.

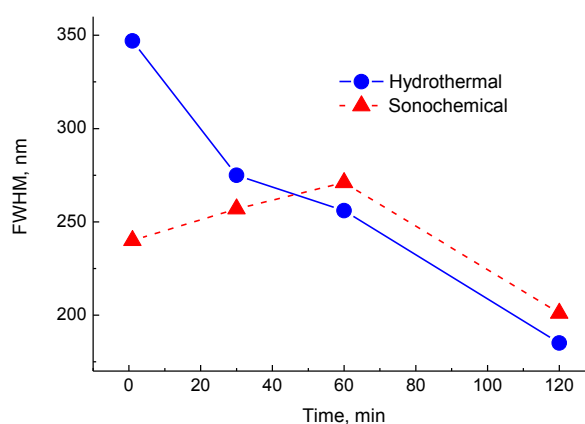


Fig. 3. FWHM of the yellow emission band vs stirring time for hydrothermal (circles, solid lines) and sonochemical (triangles, dashed lines) synthesis.

dependent on the ultrasonic amplitude and irradiation time.

All synthesized samples demonstrate strong PL spanning the region from 450 to 620 nm, which is typical for ZnO [29–33]. The peak position of the dominating yellow emission band observed at about 600–610 nm appears to be nearly unaffected by ultrasonic activations of the reacting mixture. In contrast, the integrated intensity and the full width at half maximum (FWHM) of the PL band are affected by ultrasound.

The integrated intensity of the yellow emission band as a function of the stirring time is displayed in Fig. 2 and appropriate change in the FWHM is shown in Fig. 3. The integrated PL intensity was normalized to its value observed in the sonochemically synthesized sample prepared at $t=1$ min. It is seen in Figs. 2 and 3 that sonochemical synthesis offers advantageous luminescence performance at stirring times smaller than ≈ 30 min for FWHM (triangles in Fig. 3) of the PL band and ≈ 1 min for integrated intensity (triangles in Fig. 2) in comparison with the hydrothermal synthesis of ZnO. The integrated intensity exhibits $\approx 20\%$ increase and the emission band displays $\approx 30\%$ narrowing in the ultrasonic field.

At $t \approx 30$ min, a decreased PL intensity and increased FWHM of the emission band are observed in the sonochemically prepared sample. On the other hand, hydrothermal sample prepared at this time demonstrates a greater integrated intensity. Finally, at $t \geq 60$ min, a slightly increased PL intensity is observed in the sonochemically prepared sample, whereas the FWHM remains almost identical in both fabrication methods.

The observed PL enhancement and FWHM narrowing in ultrasonic fields can tentatively be attributed to higher probability of the radiative transitions and narrower donor band due to sonication of the reacting mixture. The narrower band is thought to arise from improved donor distribution inside the powder grains obtained with the ultrasonic action. The shortened reaction time in the ultrasonic field is explained by an extremely high temperature at the interface between a collapsing bubble and the bulk solution, which is presumed to hasten the hydrolysis and condensation of the zinc acetate. It is therefore most likely that improvements in the ultrasonic-induced mass transport are actually responsible for the luminescence improvements at small stirring times. Prolonged sonication times turn out to increase the density of defects in the grown grain thus deteriorating the luminescence performance.

Conclusions

In summary, ultrasonic treatment of the solution of zinc acetate and sodium hydroxide with high-intensity ultrasound can bring improvements in luminescence properties of the resulting ZnO powders. Sonochemical synthesis of luminescent ZnO particles at small stirring times is found to be superior to traditional hydrothermal method in the integrated intensity and emission linewidth. One of the reasons for this behavior is the ultrasonic-induced mass transport in the reacting mixture, which improves the donor distribution in the resulting powder. This is due to the fact that acoustic cavitation, leading to the formation, growth, and

implosive collapse of bubbles in the mixture, creates extreme conditions inside the collapsing bubble and serves as the origin of the observed improvements in

the powder grown from the sonicated liquid-solid slurry.

Список використаних джерел

References

1. ZnO nanostructures: growth, properties and applications / A. B. Djurišić, X. Chen, Y. H. Leunga, Y. H. Ching. // *Journal of Materials Chemistry*. – 2012. – №22. – P. 6526–6535.
2. Djurišić A. B. ZnO nanostructures for optoelectronics: Material properties and device applications / A. B. Djurišić, A. N. Ching, X. Y. Chen. // *Progress in Quantum Electronics*. – 2010. – №34. – P. 191–259.
3. Comparative study of ultraviolet detectors based on ZnO nanostructures grown on different substrates / H. I. Abdulgafour, Z. Hassan, N. M. Ahmed, F. K. Yam. // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – №112. – p. 074510.
4. Kołodziejczak-Radzimska A. Zinc Oxide—From Synthesis to Application: A Review / A. Kołodziejczak-Radzimska, T. Jesionowski. // *Materials*. – 2014. – №7. – P. 2833–2881.
5. Song R. Synthesis and characterization of mercaptoacetic acid-modified ZnO nanoparticles / R. Song, Y. Liu, L. He // *Solid State Sciences*. – 2008. – №10. – P. 1563–1567.
6. Large-scale synthesis of flowerlike ZnO nanostructure by a simple chemical solution route and its gas-sensing property / [J. Huang, Y. Wu, C. Gu et al.]. // *Sensors and Actuators B: Chemical*. – 2010. – №146. – P. 206–212.
7. Li J. Multilayered ZnO Nanosheets with 3D Porous Architectures: Synthesis and Gas Sensing Application / J. Li, H. Fan, X. Jia. // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2010. – №114. – P. 14684–14691.
8. IGZO thin film transistor biosensors functionalized with ZnO nanorods and antibodies / [Y. Shen, C. Yang, S. Chen et al.]. // *Biosensors and Bioelectronics*. – 2014. – №54. – P. 306–310.
9. Photocatalysis of two-dimensional honeycomb-like ZnO nanowalls on zeolite / [Z. Liu, Z. Liu, T. Cui et al.]. // *Chemical Engineering Journal*. – 2014. – №235. – P. 257–263.
10. Ultra-high sensitive hydrazine chemical sensor based on low-temperature grown ZnO nanoparticles / [S. K. Mehta, K. Singh, A. Umar et al.]. // *Electrochimica Acta*. – 2012. – №69. – P. 128–133.
11. Xie J. QCM chemical sensor based on ZnO
1. DJURIŠIĆ, A. B., CHEN, X., LEUNG, Y. H. and MAN C. NG, A. (2012) ZnO nanostructures: growth, properties and applications. *Journal of Materials Chemistry* 22, p. 6526.
2. DJURIŠIĆ, A.B., NG, A.M.C. and CHEN, X.Y. (2010) ZnO nanostructures for optoelectronics: *Progress in Quantum Electronics* 34, p. 191–259.
3. ABDULGAFOUR, H I, HASSAN, Z, AHMED, N M and YAM, F K. (2012) Comparative study of ultraviolet detectors based on ZnO nanostructures grown on different substrates. *Journal of Applied Physics* 112, p. 074510.
4. KOŁODZIEJCZAK-RADZIMSKA, A. and JESIONOWSKI, T. (2014) Zinc Oxide—From Synthesis to Application: A Review. *Materials* 7, p. 2833–2881.
5. SONG, R., LIU, Y. and HE, L. (2008) Synthesis and characterization of mercaptoacetic acid-modified ZnO nanoparticles. *Solid State Science* 10, p. 1563–1567.
6. HUANG, J., WU, Y., GU, C., ZHAI, M., YU, K.. (2010) Large-scale synthesis of flowerlike ZnO nanostructure by a simple chemical solution route and its gas-sensing property. *Sensors and Actuators, B: Chemical* 146, p. 206–212.
7. LI, J., FAN, H. and JIA, X.a (2010) Multilayered ZnO nanosheets with 3D porous architectures: Synthesis and gas sensing application. *The Journal of Physical Chemistry C* 114, p. 14684–14691.
8. SHEN, Yi C., YANG, C. H., CHEN, S. W., WU, S. H., YANG, T. L. and HUANG, J. J. (2014) IGZO thin film transistor biosensors functionalized with ZnO nanorods and antibodies. *Biosensors and Bioelectronics* 54, p. 306–310.
9. LIU, Z., LIU, Z., CUI, T., LI, J.i, ZHANG, J., CHEN, T., WANG, X. and LIANG, X. (2014) Photocatalysis of two-dimensional honeycomb-like ZnO nanowalls on zeolite. *Chemical Engineering Journal* 235, p. 257–263.
10. MEHTA, S. K., SINGH, K., UMAR, A., CHAUDHARY, G. R. and SINGH, S. (2012) Ultra-high sensitive hydrazine chemical sensor based on low-temperature grown ZnO nanoparticles. *Electrochim. Acta* 69, p. 128–133.
11. XIE, J., WANG, H. and DUAN, M. (2014)

- colloid spheres for the alcohols / J. Xie, H. Wang, M. Duan. // *Sensors and Actuators B: Chemical*. – 2014. – №203. – P. 239–244.
12. Wu J. Soft Processing of Hierarchical Oxide Nanostructures for Dye-Sensitized Solar Cell Applications / J. Wu, W. Liao, M. Yoshimura. // *Nano Energy*. – 2013. – №2. – P. 1354–1372.
13. Vidor F. F. Low temperature fabrication of a ZnO nanoparticle thin-film transistor suitable for flexible electronics / F. F. Vidor, G. I. Wirth, U. Hilleringmann. // *Microelectronics Reliability*. – 2014. – №54. – P. 2760–2765.
14. Kadota M. Surface acoustic wave characteristics of a ZnO/quartz substrate structure having a large electromechanical coupling factor and a small temperature coefficient // M. Kadota *Japanese J. Appl. Physics, Part 1 Regul. Pap. Short Notes Rev. Pap.* –1997. – №. 36. – P. 3076–3080.
15. Chiou W. Growth of single crystal ZnO nanowires using sputter deposition / W. Chiou, W. Wu, J. Ting. // *Diamond and Related Materials*. – 2003. – №12. – P. 1841–1844.
16. Yao B.D. Formation of ZnO nanostructures by a simple way of thermal evaporation/ Yao B.D., Chan Y.F., Wang N. // *Appl. Phys. Lett.* –2002. – № 81– P. 757–759.
17. Periyat P. Sol–gel derived nanocrystalline ZnO photoanode film for dye sensitized solar cells. Periyat P., Ullattil S.G. // *Mater. Sci. Semicond.* – 2015. – №. 31. – P. 139–146.
18. Control of ZnO Morphology via a Simple Solution Route / [J. Zhang, Lingdong, Jialu et al.]. // *Chemistry of Materials*. – 2002. – №14. – P. 4172–4177.
19. Hydrothermal synthesis and characterization of ZnO nanorods / H.Wei., Y. Wu, N. Lun, C. Hu. // *Materials Science and Engineering: A*. – 2005. – №393. – P. 80–82.
20. Fu D. Size-controlled synthesis and photocatalytic degradation properties of nano-sized ZnO nanorods/ Fu D., Han G., Meng C. // *Mater. Lett.* – 2012. – №. 72. – P. 53–56.
21. Ultrasound assisted additive free synthesis of nanocrystalline zinc oxide / [K. D. Bhatte, S. Fujita, M. Arai et al.]. // *Ultrasonics Sonochemistry*. – 2011. – №18. – P. 54–58.
22. Ultrasound assisted synthesis of nanocrystalline zinc oxide: Experiments and modelling / [M. Hosni, S. Farhat, F. Schoenstein et al.]. // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2014. – №615. – P. 472–475.
23. Zinc oxide nano-particles – Sonochemical synthesis, characterization and application for photo-remediation of heavy metal / P.Banerjee, S. Chakrabarti, S. Maitra, B. K. Dutta. // *Ultrasonics QCM chemical sensor based on ZnO colloid spheres for the alcohols. Sensors and Actuators B: Chem.* Vol. 203, p. 239–244.
12. WU, J. J., LIAO, W. P. and YOSHIMURA, M.(2013) Soft processing of hierarchical oxide nanostructures for dye-sensitized solar cell applications. *Nano Energy* 2, p. 1354–1372.
13. VIDOR, F. F., WIRTH, G. I. and HILLERINGMANN, U. (2014) Low temperature fabrication of a ZnO nanoparticle. *Microelectronics Reliability* 54, p. 2760–2765.
14. KADOTA, M. (1997) Surface acoustic wave characteristics of a ZnO/quartz substrate structure having a large electromechanical coupling factor and a small temperature coefficient. *Japanese J. Appl. Physics, Part 1 Regul. Pap. Short Notes Rev. Pap.* 36, p. 3076–3080.
15. CHIOU, W.-T., WU, W.-Y. and TING, J.-M. (2003) Growth of single crystal ZnO nanowires using sputter deposition. *Diamond and Related Materials* 12, p. 1841–1844.
16. AYO, B. D., CHAN, Y. F. and WANG, N. (2002) Formation of ZnO nanostructures by a simple way of thermal evaporation. *Appl. Phys. Lett.* 81, p. 757–759.
17. PERIYAT, P. and ULLATTIL, S.G. (2015) Sol–gel derived nanocrystalline ZnO photoanode film for dye sensitized solar cells. *Mat. Science in Semiconductor Processing* 31, p. 139–146.
18. ZHANG, J., SUN, L., YIN, J., SU, H., LIAO, C. (2002) Control of ZnO morphology via a simple solution route. *Chemistry of Materials* 14, p. 4172–4177.
19. WEI, H., WU, Y., LUN, N. and HU, C. (2004) Hydrothermal synthesis and characterization of ZnO nanorods. *Materials Science and Engineering: A* 393, p. 80–82.
20. FU, D., HAN, G. and MENG, C. (2012) Size-controlled synthesis and photocatalytic degradation properties of nano-sized ZnO nanorods. *Mater Lett.* 72, p. 53–56.
21. BHATTE, K. D., FUJITA, S. I., ARAI, M., PANDIT, A. B. and BHANAGE, B. M. (2011) Ultrasound assisted additive free synthesis of nanocrystalline zinc oxide. *Ultrasonics Sonochem.* 18, p. 54–58.
22. HOSNI, M., FARHAT, S., SCHOENSTEIN, F., KARMOUS, F., JOUINI, N., VIANA, B. and MGAIDI, A. (2013) Ultrasound assisted synthesis of nanocrystalline zinc oxide. *Journal of Alloys and Compounds* 615, p. 10–13.
23. BANERJEE, P., CHAKRABARTI, S., MAITRA, S. and DUTTA, B. K. (2012) Zinc oxide nano-particles – Sonochemical synthesis, characterization and application for photo-

Sonochemistry. – 2012. – №19. – P. 85–93.

24. Chatel G. Ionic liquids and ultrasound in combination: synergies and challenges / Chatel G., MacFarlane D.R. // *Chem. Soc. Rev. Royal Society of Chemistry*. – 2014. – №. 43. – P. 8132–8149.

25. Pang Y.L. Review on sonochemical methods in the presence of catalysts and chemical additives for treatment of organic pollutants in wastewater/ Pang Y.L., Abdullah A.Z., Bhatia S. // *Desalination*. – 2011. – №. 277. – P. 1–14.

26. High UV absorption efficiency of nanocrystalline ZnO synthesized by ultrasound assisted wet chemical method / N. R.Panda, D. Sahu, B. S. Acharya, P. Nayak. // *Current Applied Physics*. – 2015. – №15. – P. 389–396.

27. Ultrasound-assisted green synthesis of nanocrystalline ZnO in the ionic liquid [hmim][NTf₂] / E. K.Goharshadi, Y. Ding, M. N. Jorabchi, P. Nancarrow. // *Ultrasonics Sonochemistry*. – 2009. – №16. – P. 120–123.

28. The potential of sonicated water in the cleaning processes of silicon wafers / [A. Podolian,, A. Nadtochiy, V. Kuryliuk et al.]. // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. – 2011. – №95. – P. 765–772.

29. Synthesis of blue emitting ZnO nanorods exhibiting room temperature ferromagnetism / A.Jana, P. S. Devi, A. Mitra, N. R. Bandyopadhyay // *Materials Chemistry and Physics*. – 2013. – №139. – P. 431–436.

30. L. Saikia Photocatalytic performance of ZnO nanomaterials for self sensitized degradation of malachite green dye under solar light / [L. Saikia, D. Bhuyan, M. Saikia et al.]. // *Applied Catalysis A: General*. – 2015. – №490. – P. 42–49.

31. Gharagozlou M. A green chemical method for synthesis of ZnO nanoparticles from solid-state decomposition of Schiff-bases derived from amino acid alanine complexes / M. Gharagozlou, Z. Baradaran, R. Bayati. // *Ceramics International*. – 2015. – №41. – P. 8382–8387.

32. Hydrogen passivation effect on the yellow-green emission band and bound exciton in n - ZnO / M.Kim, J. Oh, S. Kim, W. C. Yang. // *Solid State Communications*. – 2011. – №151. – P. 768–770.

33. PL study of oxygen defect formation in ZnO nanorods / C.Chandrinou, N. Boukos, C. Stogios, A. Travlos. // *Microelectronics Journal*. – 2009. – №40. – P. 296–298.

remediation of heavy metal. *Ultrasonics Sonochem.* 19, p. 85–93.

24. CHATEL, G. and MACFARLANE, D. R.(2014) Ionic liquids and ultrasound in combination: synergies and challenges. *Chem. Soc. Rev. Royal Society of Chemistry* 43, p. 8132–8149.

25. PANG, Y. L., ABDULLAH, A. Z. and BHATIA, S. (2011) Review on sonochemical methods in the presence of catalysts and chemical additives for treatment of organic pollutants in wastewater. *Desalination* 277 (1-3), p. 1–14.

26. PANDA, N.R., SAHU, D., ACHARYA, B.S. and NAYAK, P. (2015) High UV absorption efficiency of nanocrystalline ZnO synthesized by ultrasound assisted wet chemical method. *Current Applied Physics* 15, p. 389–396.

27. GOHARSHADI, E. K., DING, Y., JORABCHI, M. N. and NANCARROW, P. (2009) Ultrasound-assisted green synthesis of nanocrystalline ZnO in the ionic liquid [hmim][NTf₂]. *Ultrasonics Sonochem.* 16, p. 120–123.

28. PODOLIAN, A., NADTOCHIY, A., KURYLIUK, V., KOROTCHENKOV, O., SCHMID, J., DRAPALIK, M. and SCHLOSSER, V. (2011) The potential of sonicated water in the cleaning processes of silicon wafers. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 95, p. 765–772.

29. JANA, A., SUJATHA DEVI, P., MITRA, A. and BANDYOPADHYAY, N. R. (2013) Synthesis of blue emitting ZnO nanorods exhibiting room temperature ferromagnetism. *Materials Chemistry and Physics* 139, p. 431–436.

30. SAIKIA, L., BHUYAN, D., SAIKIA, M., MALAKAR, B., DUTTA, D. K.r and SENGUPTA, P. (2015) Photocatalytic performance of ZnO nanomaterials for self sensitized degradation of malachite green dye under solar light. *Applied Catalysis A: General* 490, p. 42–49.

31. GHARAGOZLOU, M., BARADARAN, Z. and BAYATI, R. (2015) A green chemical method for synthesis of ZnO nanoparticles from solid-state decomposition of Schiff-bases derived from amino acid alanine complexes. *Ceramics International*. 41, p. 8382–8387.

32. KIM, M. D., OH, J. E., KIM, S. G. (2011) Hydrogen passivation effect on the yellowgreen emission band and bound exciton in n - ZnO. *Solid State Communications*. 151, p. 768–770.

33. CHANDRINO, C., BOUKOS, N., STOGIOS, C. and TRAVLOS, A. (2009) PL study of oxygen defect formation in ZnO nanorods. *Microelectronics Journal* 40, p. 296–298.

Надійшла до редколегії 26.06.15

УДК 535.343.9

Лопатинська О. Г.¹, асист.,
Лопатинський А. М.², к.ф.-м.н., н.с.,
Чегель В. І.³, к.ф.-м.н., с.н.с.,
Поперенко Л. В.⁴, д.ф.-м.н., проф.

Локалізований поверхневий плазмонний резонанс в наночастинках срібла в полімерній матриці

^{1,4}Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська, 64/13,
e-mail: ¹olga_lopatynska@ukr.net,
^{2,3}Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, 03028, м. Київ, просп. Науки, 41.

O. G. Lopatynska¹, assist.,
A. M. Lopatynskyi², PhD, Res.,
V. I. Chegel³, PhD, Sen. Sci. Res.,
L. V. Poperenko⁴, Dr. Sci., Prof.

Localized surface plasmon resonance in the silver nanoparticles embedded in the polymer matrix

^{1,4}Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st., 64/13,
e-mail: ¹olga_lopatynska@ukr.net,
^{2,3}V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, 03028, Kyiv, Nauki ave., 41.

Взаємодія електромагнітних хвиль з біомолекулами та наноструктурованими матеріалами є цікавим об'єктом для досліджень сучасної біофізики, яка використовує різні фізичні явища для дослідження біологічних об'єктів. Серед цих явищ широко застосовуються поверхневий плазмонний резонанс (ППР) та локалізований поверхневий плазмонний резонанс (ЛППР). Дана робота пов'язана з дослідженням оптичних властивостей композитної полімерної плівки полівінілового спирту зі срібними наночастинками всередині та змін її оптичних властивостей при взаємодії з біомолекулами. Спектри оптичної густини досліджуваних зразків вимірювались за допомогою новітнього оптоелектронного сенсора "Наноплазмон-003", розробленого в Інституті фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАНУ. Теоретичне моделювання спектрів пропускання проводилось за допомогою теорії ефективного середовища Максвелл-Гарнетта. Показано, що результати теоретичного моделювання дають гарне узгодження з експериментом, як якісно, так і кількісно.

Ключові слова: локалізований поверхневий плазмонний резонанс, наночастинка, полімер.

Interaction of electromagnetic waves with biomolecules and nanostructured materials is of interest in biophysics and optoelectronics methods, which exploit different physical phenomena for the biological objects investigation. Among these phenomena, surface plasmon resonance (SPR) and localized SPR (LSPR) are most widely utilized. Present work deals with studying the optical properties of the gel-like polymer matrix with embedded silver nanoparticles as the LSPR biosensor sensitive element upon its interaction with biomolecules. The absorbance spectra of the samples were measured using the novel optoelectronic sensor NanoPlasmon-003 developed in the V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine. Changes of the absorbance spectra were registered upon the penetration of biomolecules into the polymer matrix and attributed to the influence of interaction between silver nanoparticles and biomolecules on the LSPR spectrum. Theoretical simulations based on the Maxwell-Garnett effective medium theory for the multicomponent polymer matrix were carried out and resulted in a good agreement with experimental data. The studied polymer matrix with embedded silver nanoparticles was shown to be a promising sensitive element for LSPR biosensors.

Key words: localized surface plasmon resonance, nanoparticle, polymer.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Вступ

Композитні полімерні плівки із металевими плазмонними наночастинками є актуальними

об'єктами для біофізичних досліджень, оскільки вони можуть використовуватись для біосенсорики, а саме в якості чутливого елемента сенсора на явищі ЛППР. Враховуючи зв'язок між

сигналом ЛППР та факторами впливу на нього, багато вчених були зацікавлені в розробці високочутливих хімічних та біологічних сенсорів на основі плазмонних наноструктур [1].

Існує багато переваг сенсорів на основі ЛППР в порівнянні з сенсорами, що використовують інші явища. Сильне розсіяння світла, спричинене виникненням ЛППР в наночастинках шляхетних металів, дало можливість оптичного спостереження окремих наночастинок дуже малих розмірів, а саме 20 нм для срібних та 30 нм для золотих наночастинок за допомогою мікроскопії темного поля [2]. Цікавий результат отримали також С. Шульц та ін. у роботі [3]. Вони показали, що потік розсіяння окремою срібною наносферою розміром 80 нм при освітленні білим світлом еквівалентний потоку розсіяння молекул флуоресцеїну у кількості 5×10^6 або потоку розсіяння типових квантових точок у кількості 10^5 . Володіючи такими цікавими оптичними властивостями, металеві наноструктури, особливо золоті та срібні, почали широко використовуватись в якості яскравих кольорових просторових міток при побудові біологічних зображень [4], та заміняти попередні методи флуоресцентного, хемілюмінесцентного та радіоактивного мічення біологічних об'єктів. На додачу до використання в якості міток, плазмонні металеві наночастинки застосовуються для перетворення інформації про зв'язування молекул у зміни спектрів екстинкції або розсіяння світла для реєстрації біомолекул. Оскільки показники заломлення органічних молекул вищі за показники заломлення типових буферних розчинів, зв'язування органічних молекул з наночастинками спричиняє підвищення локального показника заломлення, що призводить до червоного зсуву довжини хвилі піка спектрів екстинкції та розсіяння [5]. На противагу поверхневому плазмон-поляритону, що виникає на межі поділу тонка металева плівка – діелектрик, і має досить велику глибину локалізації (сотні нанометрів) [6], відповідний параметр для локалізованого поверхневого плазмону в наносенсорах є значно меншим (десятки нанометрів) [7]. Відповідно, спектральний відгук ЛППР чутливий лише до змін в області нанорозмірного оточення металевої наночастинки. Ця обставина дає можливість застосовувати ЛППР-сенсори для відслідковування в режимі реального часу локальних змін показника заломлення, спричинених подіями біомолекулярного зв'язування поблизу поверхні наночастинки [8].

Одним з підходів до моделювання оптичних властивостей чутливих елементів ЛППР-сенсорів, зокрема композитних наносистем на основі плазмонних наночастинок, є використання теорій ефективного середовища. Метою даної роботи було дослідити оптичний відгук композитної полімерної плівки зі срібними наночастинками теоретично та порівняти отримані результати з експериментальними.

Теоретичне моделювання ЛППР-спектрів

Розглянемо багат шарову систему, яка складається з товстої скляної підкладки, на яку нанесена плівка полімеру з наночастинками срібла, та зовнішнього середовища, розташованого у кюветі – буферного розчину, що також може містити біомолекули (рис. 1).

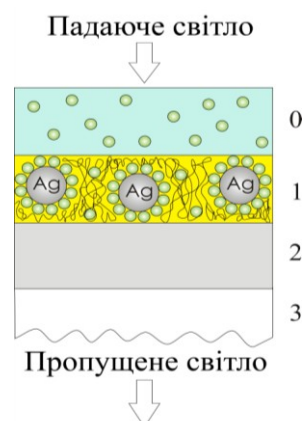


Рис. 1. Схематичне зображення досліджуваної багат шарової структури: 0 – шар буферного розчину з біомолекулами; 1 – шар, що складається з полімеру, буферного розчину, біомолекул та наночастинок срібла, покритих біомолекулами; 2 – скляна підкладка; 3 – повітря.

На систему падає лінійно поляризоване світло перпендикулярно до поверхні кювети (нормальне падіння). Пропускання такої системи може бути розраховане за допомогою формули [9]:

$$T_{total} = \frac{n_2 \left(\left| \frac{t_{01} \cdot t_{12} \cdot e^{-i\beta_1}}{1 + r_{01} \cdot r_{12} \cdot e^{-2i\beta_1}} \right| \right)^2 \cdot (1 - r_{23}^2)}{n_0 \left[1 - (|r_{12} \cdot r_{23}|)^2 \right]}, \quad (1)$$

де n_m – комплексний показник заломлення m -го шару, m – номер відповідного шару (рис. 1);

$t_{m(m+1)} = \frac{2n_m}{n_{m+1} + n_m}$ – френелівський коефіцієнт
пропускання для межі поділу $m - m+1$ [10];

$r_{m(m+1)} = \frac{n_{m+1} - n_m}{n_{m+1} + n_m}$ – френелівський коефіцієнт

відбивання для межі поділу $m - m+1$ [10];

$\beta_m = \frac{2\pi d_m n_m}{\lambda}$ – фазовий зсув, який дає m -й

шар;

d_m – товщина m -го шару;

λ – довжина хвилі падаючого світла.

Так як шари 0 і 1 складаються з декількох компонент, одна з яких може бути вибрана як матриця, то ефективні показники заломлення цих шарів можуть бути розраховані за допомогою моделі ефективного середовища Максвелл-Гарнетта [11]. Тому для 0-го шару, який складається з буферного розчину та біомолекул, ефективна діелектрична проникність обчислюється з рівняння [11]:

$$\frac{\varepsilon_{eff}^0 - \varepsilon_{buffer}}{\varepsilon_{eff}^0 + 2\varepsilon_{buffer}} - f_{bio}^0 \frac{\varepsilon_{bio} - \varepsilon_{buffer}}{\varepsilon_{bio} + 2\varepsilon_{buffer}} = 0, \quad (2)$$

де ε_{eff}^0 – ефективна діелектрична проникність 0-го шару; ε_{buffer} – діелектрична проникність буферного розчину; ε_{bio} – діелектрична проникність біомолекул; $f_{bio}^0 = \frac{C_{bio}}{\rho_{bio} \cdot 1000}$ – фактор заповнення біомолекул у буферному розчині 0-го шару; C_{bio} – концентрація розчину біомолекул, мг/мл; ρ_{bio} – густина біомолекул, г/см³.

Розглянемо процес проникнення біомолекул із буферного розчину у полімерну плівку, що містить наночастинки срібла. Відомо, що при взаємодії з водними розчинами полімерні плівки можуть набухати. Це призводить до зростання товщини плівки та появи у ній буферного розчину та біомолекул у вигляді включень, а також до утворення на поверхні наночастинок срібла біомолекулярного шару. Тому для 1-го шару, який складається з плівки полімеру з наночастинами срібла, що після набухання може також містити буферний розчин та біомолекули, ефективна діелектрична проникність

$$\frac{\varepsilon_{eff}^1 - \varepsilon_{polymer}}{\varepsilon_{eff}^1 + 2\varepsilon_{polymer}} - f_{shell} \frac{(\varepsilon_{bio} - \varepsilon_{polymer})(\varepsilon_{silver} + 2\varepsilon_{bio}) + f_{silver}(2\varepsilon_{bio} + \varepsilon_{polymer})(\varepsilon_{silver} - \varepsilon_{bio})}{(\varepsilon_{bio} + 2\varepsilon_{polymer})(\varepsilon_{silver} + 2\varepsilon_{bio}) + f_{silver}(2\varepsilon_{bio} - 2\varepsilon_{polymer})(\varepsilon_{silver} - \varepsilon_{bio})} -$$

$$- f_{bio}^1 \frac{\varepsilon_{bio} - \varepsilon_{polymer}}{\varepsilon_{bio} + 2\varepsilon_{polymer}} - f_{buffer} \frac{\varepsilon_{buffer} - \varepsilon_{polymer}}{\varepsilon_{buffer} + 2\varepsilon_{polymer}} = 0, \quad (4)$$

визначається за допомогою співвідношення Максвелл-Гарнетта для чотирьохкомпонентної системи [11]:

$$\frac{\varepsilon_{eff}^1 - \varepsilon_{polymer}}{\varepsilon_{eff}^1 + 2\varepsilon_{polymer}} - f_{shell} \frac{\varepsilon_{shell} - \varepsilon_{polymer}}{\varepsilon_{shell} + 2\varepsilon_{polymer}} -$$

$$- f_{bio}^1 \frac{\varepsilon_{bio} - \varepsilon_{polymer}}{\varepsilon_{bio} + 2\varepsilon_{polymer}} - f_{buffer} \frac{\varepsilon_{buffer} - \varepsilon_{polymer}}{\varepsilon_{buffer} + 2\varepsilon_{polymer}} = 0 \quad (3)$$

де ε_{eff}^1 – комплексна ефективна діелектрична проникність 1-го шару;

$\varepsilon_{polymer}$ – діелектрична проникність полімеру;

$f_{shell} = f_{shell_bare} \frac{d_1^i}{d_1} \frac{1}{f_{silver}}$ – фактор заповнення

наночастинок срібла, покритих біомолекулярним шаром, у полімерній плівці;

f_{shell_bare} – фактор заповнення непокритих

наночастинок срібла у полімері;

d_1 – товщина композитної плівки з врахуванням набухання;

d_1^i – початкова товщина композитної плівки;

$f_{silver} = \left(\frac{1}{1 + d_{bio}} \right)^3$ – фактор заповнення

срібної наночастинок у системі наночастинок - біомолекулярна оболонка;

d_{bio} – товщина біомолекулярного шару на наночастиці, в одиницях радіусу наночастинок срібла;

ε_{shell} – комплексна діелектрична проникність наночастинок, покритих біомолекулами;

$f_{bio}^1 = f_{buffer} \cdot f_{bio}^0$ – фактор заповнення біомолекул у полімерній плівці;

f_{buffer} – фактор заповнення буферного розчину у полімерній плівці.

Для визначення вкладу наночастинок срібла з біомолекулярною оболонкою у ефективну діелектричну проникність полімерної плівки, у вищевказаній формулі поляризованість сфери варто замінити на поляризованість сфери з оболонкою [11], і формула набуде вигляду:

де ε_{silver} – комплексна діелектрична проникність срібної наночастинки.

Результати та обговорення

Експериментально отримані спектральні залежності оптичної густини композитних плівок полівінілового спирту (ПВС) зі срібними наночастинками при додаванні різних концентрацій розчину білку бичачого сироваткового альбуміну (БСА) у фосфатному буфері сольовому (ФБС) наведено на рис. 2.

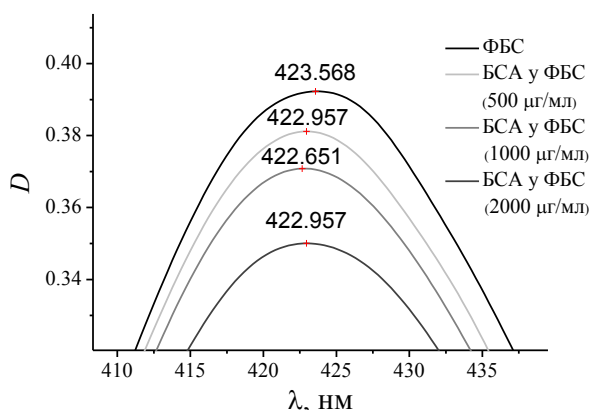


Рис. 2. Експериментально отримані спектральні залежності оптичної густини D композитної полімерної плівки з наночастинками при додаванні ФБС та різних концентрацій БСА.

Відповідна кінетична залежність оптичної густини на довжині хвилі 455,16 нм для композитних полімерних ПВС-плівок зі срібними наночастинками при додаванні різних концентрацій розчину білку БСА у ФБС наведено на рис. 3.

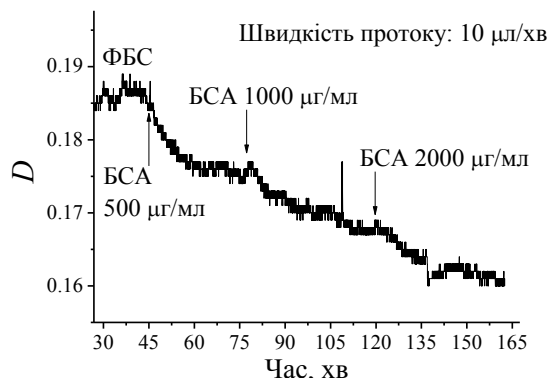


Рис. 3. Кінетична залежність оптичної густини D композитної полімерної плівки зі срібними наночастинками для $\lambda = 455,16$ нм при проходженні ФБС та різних концентрацій БСА.

Зсуви піку оптичної густини (рис. 2) та зміна оптичної густини на фіксованій довжині хвилі (рис. 3), що спостерігалися у цьому експерименті, є наслідком впливу на умови збудження ЛППР взаємодії між срібною наночастинкою та біомолекулами, що її покривають. Як бачимо, пік спектру оптичної густини при збільшенні концентрації розчину БСА все більше зміщується в сторону менших довжин хвиль, що є достатньо неочікуваним і може пояснюватись тим, що до гетеросистеми додається фракція з меншим показником заломлення (показник заломлення полімеру складає 1,5, а показник заломлення білку є рівним 1,46). Тому для більш детального пояснення цього факту спектри досліджуваних композитних плівок були змодельовані теоретично. В межах обраної моделі розглядаємо біомолекулярне покриття як однорідну оболонку срібної сферичної наночастинки.

За допомогою описаного у теоретичній частині підходу були змодельовані спектри оптичної густини досліджуваної системи в залежності від довжини хвилі для різних початкових товщин полімерного шару (50 нм, 100 нм, 150 нм, 200 нм) та різних товщин біомолекулярного шару на наночастинці (в одиницях радіусу наночастинки від 0 до 2). Результат моделювання для початкової товщини полімеру 50 нм наведено на рис. 4.

За результатами отриманих спектрів була побудована залежність положення піку оптичної густини від товщини біомолекулярного шару на наночастинці для різних початкових товщин полімеру, що зображена на рис. 5.

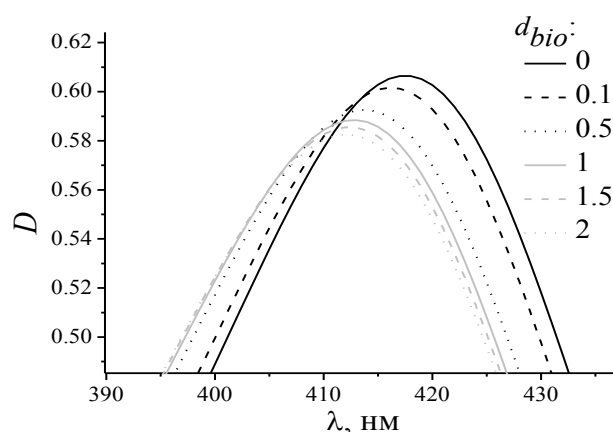


Рис. 4. Спектри оптичної густини D для початкової товщини полімеру 50 нм при різних значеннях товщин біомолекулярного шару на наночастинці срібла d_{bio} .

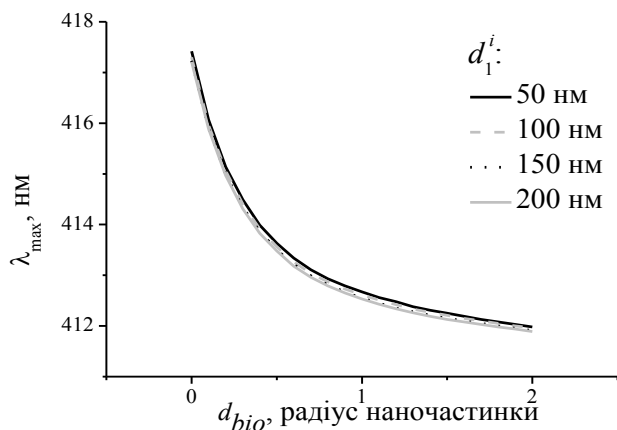


Рис. 5. Залежність положення піку оптичної густини $\lambda_{\max}$ від товщини біомолекулярного шару d_{bio} на наночастинці срібла для різних значень початкової товщини полімеру d_1^i .

З даних залежностей видно, що початкова товщина полімеру практично не впливає на зсув положення піку оптичної густини, а впливає лише на його абсолютне положення, тому більш детально було розглянуто залежність зсуву положення піку оптичної густини від товщини біомолекулярного шару на наночастинці для початкової товщини полімеру 50 нм, а також проведено її порівняння з експериментальними даними.

На рис. 6 наведено теоретично змодельовану залежність зсуву положення піку оптичної густини від товщини біомолекулярного шару на поверхні наночастинок та нанесені експериментальні значення зсуву положення піку оптичної густини для різних концентрацій біомолекул.

Необхідно зазначити, що теоретична залежність зсуву положення піку оптичної густини побудована в залежності від товщини біомолекулярного шару на наночастинці, а експериментальні отримані величини зсувів від концентрації, але так як між концентрацією та товщиною біомолекулярного шару на наночастинці існує певний пропорційний зв'язок (нами не визначений), то їх можна порівнювати і співвідносити ці величини. Також з отриманих результатів видно, що напрямки зсуву положення піку оптичної густини, які розраховані теоретично та отримані експериментально,

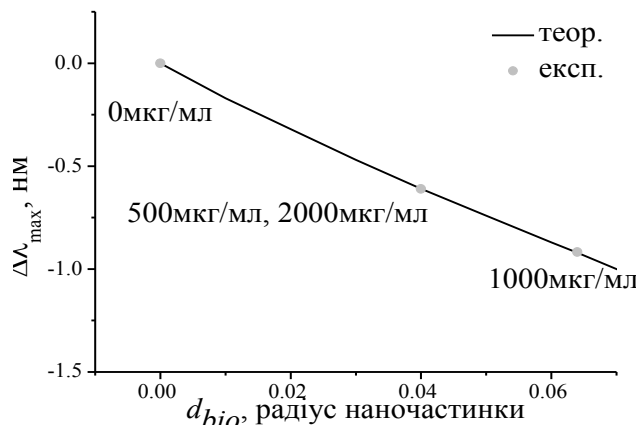


Рис. 6. Теоретично змодельована залежність зсуву положення піку оптичної густини $\Delta\lambda_{\max}$ від товщини біомолекулярного шару d_{bio} на наночастинці срібла для початкової товщини полімеру 50 нм та експериментальні значення зсуву положення піку оптичної густини для різних концентрацій.

співпадають, а самі величини зсувів добре співвідносяться, що говорить про те, що представлена теоретична модель добре узгоджується з експериментом (як якісно, так і кількісно).

Висновки

На основі порівняння експериментальних спектрів оптичної густини композитних полімерних ПВС-плівок зі срібними наночастинками при додаванні різних концентрацій розчину білку БСА у ФБС з теоретично змодельованими із застосуванням теорії ефективного середовища Максвелл-Гарнетта з'ясовано, що обрана теоретична модель добре узгоджується з експериментальними даними. Також за допомогою розрахованих спектрів оптичної густини для різних значень початкової товщини полімеру показано, що початкова товщина полімеру практично не впливає на зсув положення піку оптичної густини, а впливає лише на його абсолютне положення.

Список використаних джерел

1. Mayer K.M. Localized surface plasmon resonance sensors / Mayer K.M., Hafner J.H. // *Chemical Reviews*. – 2011. – Vol. 111. – P. 3828-3857.
2. Anker J.N. Biosensing with plasmonic nanosensors / Anker J.N., Hall W.P., Lyandres O., Shah N.C., Zhao J., Van Duyne R.P. // *Nature Materials*. – 2008. – Vol. 7. – P. 442-453.
3. Schultz S. Single-target molecule detection with nonbleaching multicolor optical immunolabels / Schultz S., Smith D.R., Mock J.J., Schultz D.A. // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. – 2000. – Vol. 97. – P. 996-1001.
4. Sau T.K. Properties and applications of colloidal nonspherical noble metal nanoparticles / Sau T.K., Rogach A.L., Jäckel F., Klar T.A., Feldmann J. // *Advanced Materials*. – 2010. – Vol. 22. – P. 1805-1825.
5. Lodewijks K. Boosting the figure-of-merit of LSPR-based refractive index sensing by phase-sensitive measurements / Lodewijks K., Van Roy W., Borghs G., Lagae L., Van Dorpe P. // *Nano Letters*. – 2012. – Vol. 12. – P. 1655-1659.
6. Haes A.J. Preliminary studies and potential applications of localized surface plasmon resonance spectroscopy in medical diagnostics / Haes A.J., Van Duyne R.P. // *Expert Review of Molecular Diagnostics*. – 2004. – Vol. 4. – P. 527-537.
7. Hsu S.-W. Tunable and directional plasmonic coupling within semiconductor nanodisk assemblies / Hsu S.-W., Ngo C., Tao A.R. // *Nano Letters*. – 2014. – Vol. 14. – P. 2372-2380.
8. Hendry E. Ultrasensitive detection and characterization of biomolecules using superchiral fields / Hendry E., Carpy T., Johnston J., Popland M., Mikhaylovskiy R.V., Laphorn A.J., Kelly S.M., Barron L.D., Gadegaard N., Kadodwala M. // *Nature Nanotechnology*. – 2010. – Vol. 5. – P. 783-787.
9. Joo H.-Y. Spectrophotometric analysis of aluminum nitride thin films / Joo H.-Y., Kim H.J., Kim S.J., Kim S.Y. // *Journal of Vacuum Science & Technology A*. – 1999. – Vol. 17. – P. 862-870.
10. Born M. Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction / Born M., Wolf E., Bhatia A.B. – Cambridge: University Press, 2000. – 986 p.
11. Венгер Є.Ф. Оптика малих частинок і диперсних середовищ / Венгер Є.Ф., Гончаренко А.В., Дмитрук М.Л. – Київ: Наукова думка, 1999. – 347 с.

References

1. MAYER, K., HAFNER, J. (2011) Localized surface plasmon resonance sensors. *Chemical Reviews*. 111. p. 3828-3857.
2. ANKER, J., HALL, W., LYANDRES, O., SHAH, N., ZHAO, J., VAN DUYNE, R. (2008) Biosensing with plasmonic nanosensors. *Nature Materials*. 7. p. 442-453.
3. SCHULTZ, S., SMITH, D., MOCK, J., SCHULTZ, D. (2000) Single-target molecule detection with nonbleaching multicolor optical immunolabels. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. 97. p. 996-1001.
4. SAU, T., ROGACH, A., JACKEL, F., KLAR, T., FELDMANN, J. (2010) Properties and applications of colloidal nonspherical noble metal nanoparticles. *Advanced Materials*. 22. p. 1805-1825.
5. LODEWIJKS, K., VAN ROY, W., BORGHS, G., LAGAE, L., VAN DORPE, P. (2012) Boosting the figure-of-merit of LSPR-based refractive index sensing by phase-sensitive measurements. *Nano Letters*. 12. p. 1655-1659.
6. HAES, A., VAN DUYNE, R. (2004) Preliminary studies and potential applications of localized surface plasmon resonance spectroscopy in medical diagnostics. *Expert Review of Molecular Diagnostics*. 4. p. 527-537.
7. HSU, S.-W., NGO, C., TAO, A. (2014) Tunable and directional plasmonic coupling within semiconductor nanodisk assemblies. *Nano Letters*. 14. p. 2372-2380.
8. HENDRY, E., CARPY, T., JOHNSTON, J., POPLAND, M., MIKHAYLOVSKIY, R., LAPHORN, A., KELLY, S., BARRON, L., GADEGAARD, N., KADODWALA, M. (2010) Ultrasensitive detection and characterization of biomolecules using superchiral fields. *Nature Nanotechnology*. 5. p. 783-787.
9. JOO, H.-Y., KIM, H., KIM, S., KIM, S. (1999) Spectrophotometric analysis of aluminium nitride thin films. *Journal of Vacuum Science & Technology A*. 17. p. 862-870.
10. BORN, M., WOLF, E., BHATIA, A. (2000) *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction*. Cambridge: University Press.
11. VENGER, E., GONCHARENKO, A., DMITRYK, M. (1999) *Optics of small particles and disperse media*. Kyiv: Vydavnytstvo "Naukova dumka".

Надійшла до редколегії 4.09.15

УДК 535.34

Мельник Д. Б.¹, асп.,
Науменко А. П.², к.ф.-м.н, с.н.с.,
Ящук В. М.³, д.ф.-м.н., проф.,
Герасов А.О.⁴, к.х.н., інж.,
Качковський О.Д.⁵, д.х.н., проф.

Спектри поглинання та анізотропії збудження флюоресценції мероціанінів, похідних амінокумарину

^{1,2,3}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: ¹dimomel@gmail.com,
²a_naumenko@univ.kiev.ua,
³yashchukvaleriy@gmail.com,
^{4,5}Інститут органічної хімії, НАН України,
03660, м. Київ, вул. Мурманська 5,
e-mail: ⁴andreychem@gmail.com,
⁵adkachkovsky@mail.ru.

D.B. Melnyk¹, PhD stud.,
A.P. Naumenko², PhD., Sen. Sci. Res.
V.M. Yashchuk³, Dr. Sci., Prof.,
A.O. Gerasov⁴, PhD. Sci., Eng.,
O.D. Kachkovsky⁵, Dr. Sci., Prof.

The absorption and fluorescence anisotropy spectra of merocyanins, aminocoumarine derivates

^{1,2,3}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: ¹dimomel@gmail.com,
²a_naumenko@univ.kiev.ua,
³yashchukvaleriy@gmail.com,
^{4,5}Institute of Organic Chemistry, NAS of Ukraine,
03660, Kyiv, 5 Murmanska str.,
e-mail: ⁴andreychem@gmail.com,
⁵adkachkovsky@mail.ru.

Методами спектрального аналізу досліджено ряд мероціанінових барвників, похідних амінокумарину і відповідних їм симетричних аніонних та катіонних поліметинових барвників в розчині ацетонітрилу та етиленгліколі при низькій концентрації за температури $T = 300$ К. Отримані дані були інтерпретовані з допомогою квантово-хімічних розрахунків й дали можливість якісно проаналізувати природу електронних переходів, та знайти довжини хвиль, що відповідають переходам у перший та другий вищі збуджені стани.

Ключові слова: мероціанінові барвники, анізотропія збудження флюоресценції, спектри поглинання, квантово-хімічні розрахунки.

Polymethine dyes have been studied for more than a century, however, they continue to be actively investigated due to their biochemical research and optical application. This paper presents the results of spectral measurements of absorption and fluorescence anisotropy as well as a quantum-chemical study of the molecular geometry and electron structure of a new series of merocyanine dyes, aminocoumarin derivatives and to compare the symmetric anionic and cationic polymethine dyes with different conjugation length ($n = 1, 2$) at temperature $T = 300$ K to understand the nature of their electronic transition. These data made it possible to localize the position of the transition to the first and second excited states and establish the link between their spectral properties, charge distribution and chemical structures. In the theoretical point view, it was established that the spectra of the merocyanines are readily interpretable and suitable for the establishment of the general relationships between the molecular topology and electron density distribution in the ground and excited states similarly to the polymethine dyes.

Key Words: merocyanines, aminocoumarin, pyridine, electron density, anisotropy.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Вступ

Серед лінійних спряжених молекул нейтральні донорно-акцепторні мероціаніни займають проміжне місце між катіонними поліметиновими барвниками з донорними кінцевими групами та аніонними барвниками з акцепторними групами [1–4]. Всі три типи мають високополяризовану

колективну систему π -електронів і проявляють схожі спектральні властивості: вузькі високо-інтенсивні смуги поглинання та смуги флюоресценції з малим стоксовим зсувом [2, 3], внаслідок чого вони можуть бути надійно інтерпретовані і придатні для встановлення загальних закономірностей між спектральними й електронними властивостями та хімічною

будовою молекул [4-6]. На унікальних спектральних властивостях ґрунтується й широке застосування мероціанінів як для нелінійної оптики в якості активних середовищ лазера з малими втратами, так - оптичних сенсорів, індикаторів полярності молекул середовища, ініціаторів в реакції полімеризації та флюоресцентних маркерів [1, 2].

Ряд мероціанінів, похідні амінокумарину, з різною довжиною поліметинового ланцюга, було синтезовано раніше й досліджено їхні лінійні та нелінійні оптичні характеристики [8,9, 10]; було показано, що формально акцепторна група містить високо розташований донорний рівень, який може сильно взаємодіяти з донорним рівнем донорної кінцевої групи: в результаті природа двох перших переходів в таких мероціанінів подібна до переходів в несиметричних катіонних поліметинових барвниках. Така подібність зростає зі збільшенням донорної сили донорної кінцевої групи.

В даній роботі представлені результати спектрального та квантово-хімічного дослідження мероціанінів 1, 2, похідних амінокумарину, які містять кінцеві групи з максимальними електронодонорними властивостями – піридин, а також, додатково для порівняння, відповідних симетричних аніонних барвників 3, 4 та катіонних барвників 5, 6: їхні формули представлені на рис. 1.

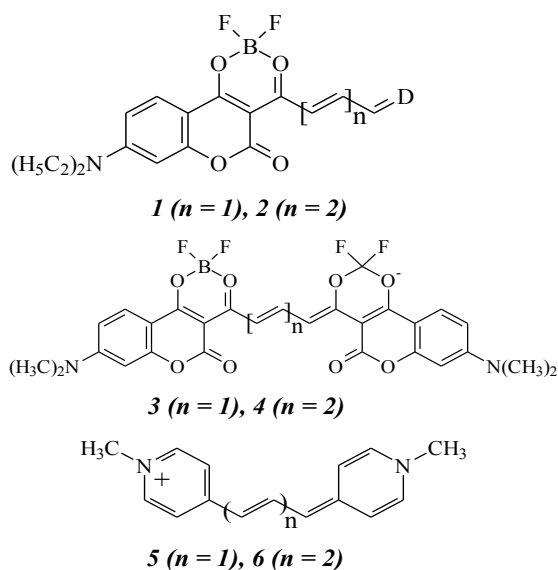


Рис. 1. Формули досліджених барвників

Синтез сполук 1-6 описаний раніше [11]: їхня будова підтверджена спектрами ^1H NMR та елементним аналізом.

Сpektри поглинання записано на спектрофотометрі Shimadzu UV-3100 в ацетонітрилі (спектральної чистоти). Їхній вигляд представлено на рис.2, а довжини максимумів довгохвильових смуг приведені в таблиці 1.

Сpektри анізотропії збудження флюоресценції було виміряно на спектрофлюориметрі Cary Eclipse (Varian, Австралія), у в'язкому розчині етиленгліколя при низькій концентрації ($C = 10^{-6}$ M).

Квантово-хімічні розрахунки проводились в програмному пакеті Gaussian 03 [12]. Оптимізація геометрії виконувалась не-емпіричним методом DFT/6-31G(d,p)/CAM-B3LYP; характеристики електронних переходів обчислені методом TD/DFT/6-31G(d,p)/CAM-B3LYP.

Результати та їх обговорення

Як видно, в спектрах всіх барвників спостерігається характерна вузька високоінтенсивна смуга поглинання. Плече на короткохвильовій частині смуги поглинання відповідає, як було показано [4], коливальному переходу: 0-1.

Далі в короткохвильовій частині інтенсивність поглинання незначна, аж до УФ частини спектра. Однак, згідно з дослідженнями [6, 8, 9], саме в цій області повинен проявлятися другий електронний перехід; він поляризований перпендикулярно до поляризації першого переходу і може бути зареєстрований за допомогою спектрів анізотропії збудження флюоресценції, які параметр анізотропії обчислювався згідно з формулою:

$$r(\lambda) = \frac{I_{\parallel}(\lambda) - G \times I_{\perp}(\lambda)}{I_{\parallel}(\lambda) + G \times 2 \times I_{\perp}(\lambda)}$$

Тоді, інтенсивність збудження флюоресценції записується як функція від хвилі збудження в паралельній ($I_{\parallel}$) та перпендикулярній ($I_{\perp}$) поляризаціях відносно поляризації випромінювання. G-фактор виражає чутливість системи реєстрації до перпендикулярної та паралельної поляризації світла [13]. Отримані спектри барвників представлено на рис. 3 (наведені графіки для барвників 1 та 5), а їх числові характеристики зібрано в таблиці 1.

Таблиця 1

Спектральні характеристики мероціанінів і симетричних барвників

Барвник	n	Перший перехід (ацетонітрил)		Другий перехід (етилен-гліколь)		
		$\lambda_{\text{макс}}$, нм	V, нм	$\lambda_{\text{мін}}$, нм	V, нм	$\Delta\lambda$, нм
1	1	564		408		156
2	2	590	26	432	24	158
3	1	616		475		141
4	2	711	95	510	35	201
5	1	596		490		106
6	2	695	99	450	40	245

Зуваження: $\lambda_{\text{макс}}$ – позиція довгохвильової смуги в спектрі поглинання; $V = \lambda_n - \lambda_{n-1}$ – вініленовий зсув; $\lambda_{\text{мін}}$ – положення першого мінімуму в спектрі анізотропії збудження флюоресценції; $\Delta\lambda = \lambda_{\text{макс}} - \lambda_{\text{мін}}$ – відстань між першими двома переходами.

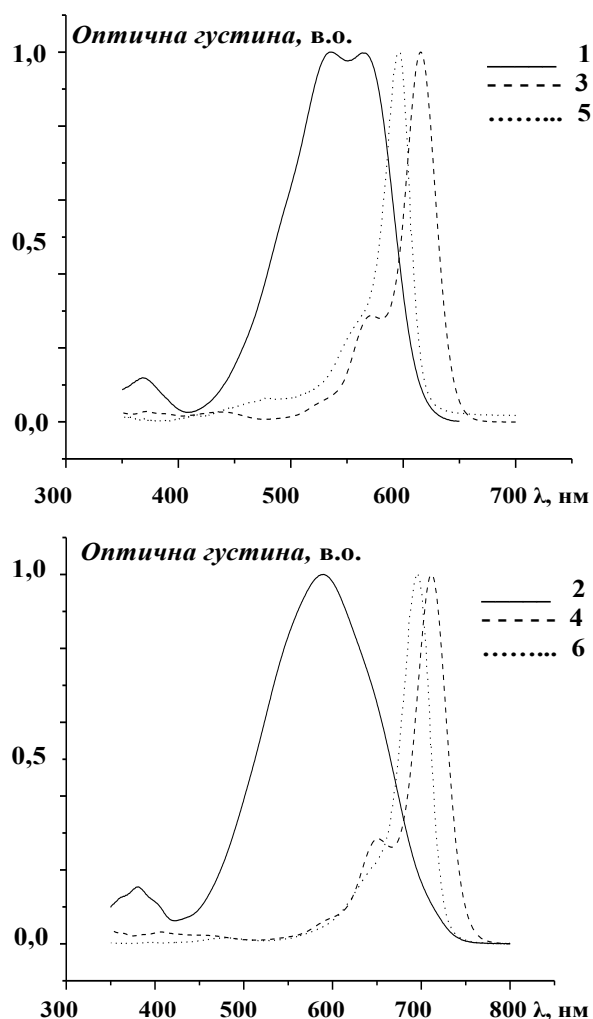


Рис. 2. Спектри поглинання мероціанінів та відповідних симетричних поліметинових барвників при $n = 1$ і $n = 2$; мероціаніни 1, 2; аніонні барвники 3, 4; катіонні барвники 5, 6.

В області 420-520 нм спостерігаються порівняно глибокі мінімуми, які відповідають переходам в другий збуджений стан, поляризованим перпендикулярно, і які не можуть бути зафіксовані за допомогою спектрів поглинання. Подібна локалізація першого та другого переходів для мероціанінів, похідних амінокуцмарину, з низько основною індоленіною доною групою підтверджена за допомогою спектрів двох-фотонного поглинання [8].

Таким чином, обидва рис. 1 і 2 чітко демонструють подібність спектрів нейтральних мероціанінів 1, 2 та відповідних симетричних аніонних і катіонних барвників. Щоб виявити причину подібності перших двох нижчих переходів було проведено квантово-хімічне дослідження електронної структури всіх молекул 1-6. Звичайно, розрахунки дають значне розходження обчислених та спектральних енергій переходів (що є типовим для цього наближення при розрахунках порівняно довгих спряжених систем [14-16]); однак розрахунки достатньо коректні, щоб аналізувати природу електронних переходів.

Рівноважна молекулярна геометрія

Розрахунки показують, що молекули 1-6 планарні, що є типовим для спряжених систем [17]. Тільки група BF₂ в амінокумариновій кінцевій групі виходить з площини основного хромофора. Вуглець-вуглецеві зв'язки у відкритому поліметиновому ланцюзі симетричних і катіонного, і аніонного барвників практично вирівняні, що можна бачити з рис. 4а. На відміну від поліметинових барвників, розрахунки дають значне чергування довжин сусідніх зв'язків в хромофорі мероціанінів, подібно до класичних полієнів [18]. Зміна довжини хромофора ($n = 1, 2$) практично не змінює амплітуди чергування довжин зв'язків.

Розподіл заряду

Розрахунки дають досить значне чергування зарядів на атомах вуглецю в хромофорі як симетричних барвників 3-6, так і мероціанінів 1-2, що представлено на рис. 4б.

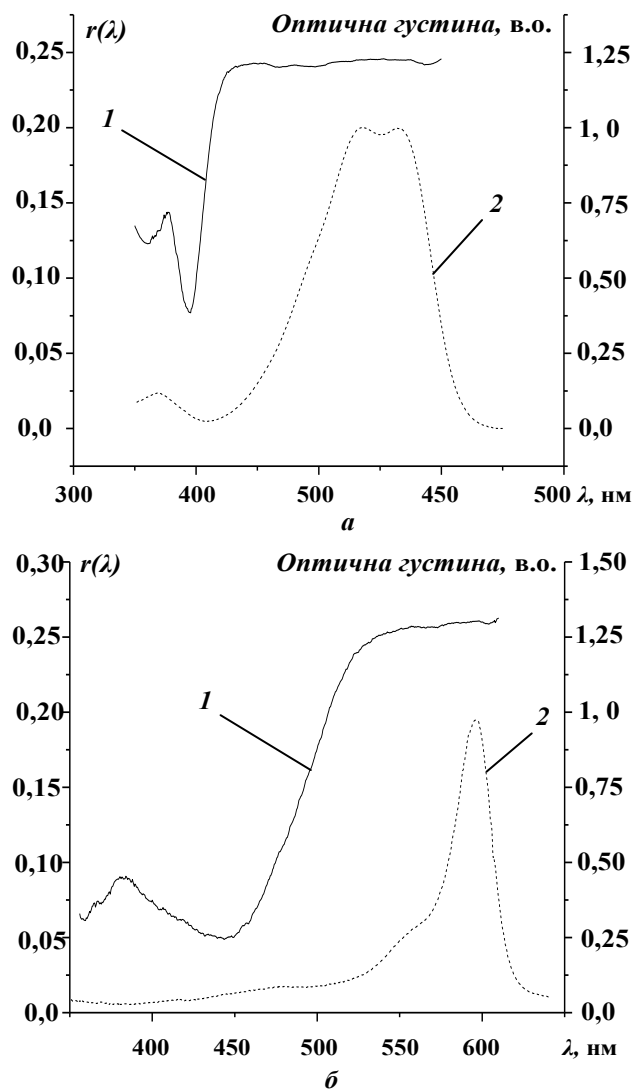


Рис. 3. Спектри анізотропії збудження флюоресценції (1) та поглинання (2) мероціаніна 1 (а) та катіонного барвника 5 (б).

Форма фронтальних і близьких орбіталей

Відносне розташування фронтальних та кількох найближчих рівнів, а також форма відповідних МО зображено на рис. 5. При переході від катіонних барвників 5, 6 до нейтральних мероціанінів 1, 2 і далі до аніонних барвників 3, 4 енергетична щільність закономірно зсуваються вгору. Як видно з рис. 5, фронтальні орбіталі повністю делокалізовані. В аніонному барвнику 4 верхня заповнена МО (ВЗМО) в основному розташована на атомах

поліметинового ланцюга, в той час як ВЗМО-1, а також наступна МО, розташована вище нижньої вакантної МО (НВМО-1), локалізовані переважно на кінцевих групах. В катіонному барвнику 6 фронтальні МО та ВЗМО-1 і НВМО+1 делокалізовані рівномірно на атомах як поліметинового ланцюга, так і кінцевих груп. Однак наступні орбіталі, ВЗМО-2 і ВЗМО-3 та НВМО+2 і НВМО+3, локалізовані, як видно з рис. 5а, практично на атомах кінцевих груп; згідно з розрахунками, вони практично попарно вироджені і є лінійною сумою та різницею МО, локалізованих на кожній окремій кінцевій групі. Як показали розрахунки, в барвнику 5 з коротшим ланцюгом локальними виявляються пари орбіталей: НВМО+1 і НВМО+2 та ВЗМО-1 і ВЗМО-2, тобто відбувається інверсія МО різної природи.

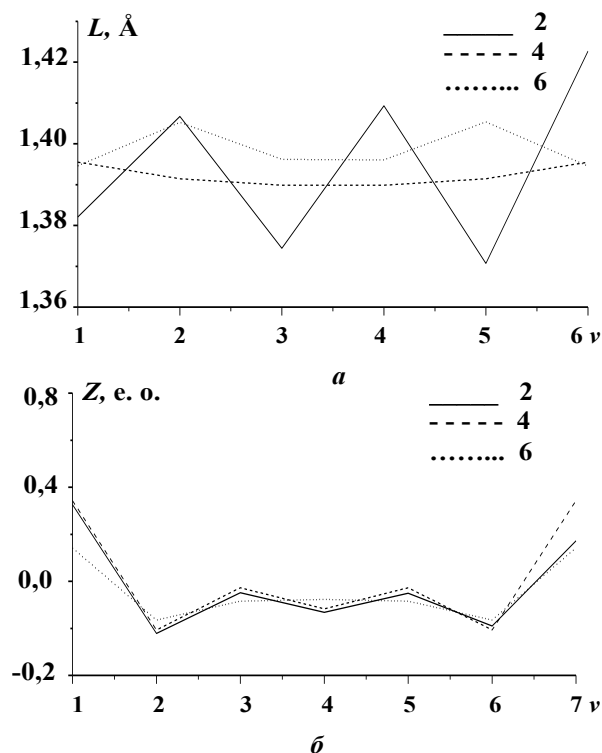


Рис. 4. Довжини СС-зв'язків (а) та заряди на атомах вуглецю (б) в залежності від номеру атому ланцюжка (v) в хромофорі мероціаніна 2, аніонного барвника 4 та катіонного барвника 6.

Участь локальних МО в електронних переходах супроводжується, як було показано раніше [4], значним переносом заряду. В нейтральному мероціаніні 2 максимальний вклад у фронтальні МО вносять атоми поліметинового ланцюга та атоми піридинової кінцевої групи (рис. 5 б). Головний висновок з аналізу форми фронтальних орбіталей полягає в тому, що

ніякого специфічного зміщення ВЗМО в бік донорної групи, а НВМО – в бік акцепторної групи, не проявляється: обидві МО в донорно-акцепторній молекулі мероціаніна 2 за формою подібні до фронтальних МО в симетричних йонних барвниках 4 та 6.

Зміщення на кінцеві групи розрахунки дають

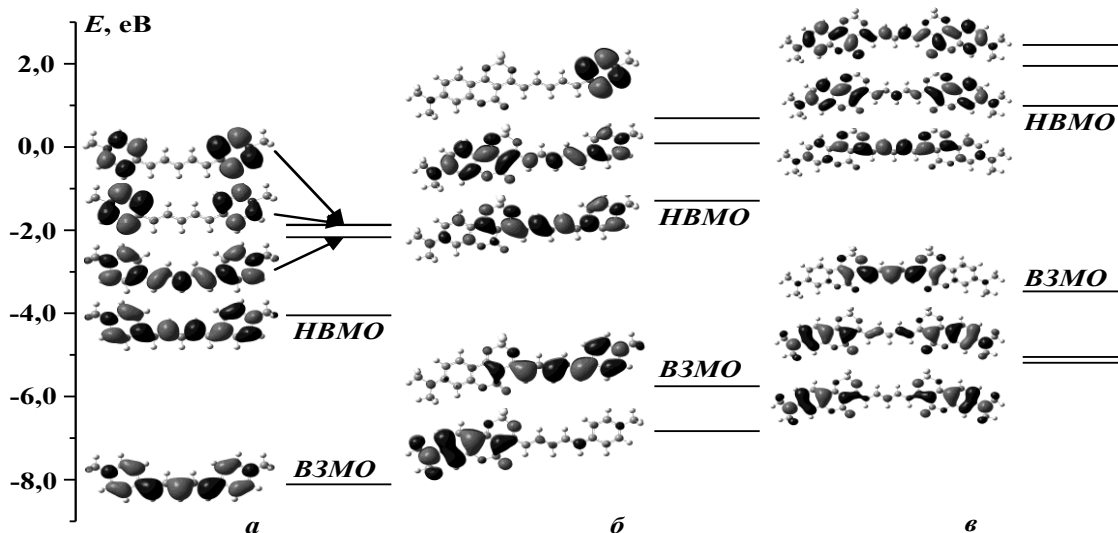


Рис. 5. Форма фронтальних і ближніх орбіталей в катіонному барвнику 6 (а) , мероціаніні 2 (б) та аніонному барвнику 4 (в)

Електронні переходи

Розраховані характеристики перших чотирьох переходів та коефіцієнти участі в них МО зібрані в таблиці 2. Перший перехід, $S_0 \rightarrow S_1$, у всіх барвників описується практично однією однократно збудженою конфігурацією за участю фронтальних МО: $S_1 \approx |VZMO \rightarrow HBMO\rangle$; йому відповідає довгохвильова смуга поглинання. Як видно з рис. 5, основний вклад у фронтальні орбіталі у всіх випадках, незалежно від типу барвника, вносять атоми поліметинового ланцюга. Відтак природа першого переходу однакова: при збудженні електронна густина переноситься з атомів вуглецю з надлишковим негативним зарядом на сусідні атоми – так званий поліметиновий тип переходу, на відміну від переходів з внутрішньо-молекулярни переносом заряду. Як результат, і форма смуги поглинання дуже подібна як в йонних барвників з акцепторними кінцевими групами (3, 4) чи донорними групами (5, 6), так і в нейтральних донорно-акцепторних мероціанінах (1, 2). Розрахунки, щоправда, дають занижені довжини хвиль, λ , а також занижений ефект подовження хромофора: $V = \lambda(n = 2) - \lambda(n = 1)$, однаке обчислені сили осцилятора першого переходу, f_1 ,

перевищують величини f_1 для вищих переходів, що добре узгоджується з експериментальними інтенсивностями смуг у спектрах поглинання.

Згідно з даними розрахунків наступними за енергією в катіонному піридоціаніні 6 є два майже вироджені переходи з ВЗМО на обидві локальні вакантні МО; дещо вищу енергію має перехід $S_0 \rightarrow S_4$, пов'язаний з ВЗМО та делокалізованою вакантною орбіталлю HBMO+1. В молекулі 5 з коротшим поліметиновим ланцюгом, в якого локальні МО нижчі (HBMO+1, HBMO+2), делокалізовані ВЗМО та HBMO+3 беруть участь також в четвертому переході, а локальні МО формують практично вироджені другий та третій переходи. Оскільки переходи за участю локальних рівнів в спектрах анізотропії проявляються нечітко [4, 19, 20], то експериментальному першому мінімуму в спектрі анізотропії піридоціанінів відповідає перехід $S_0 \rightarrow S_4$; обчислений вініленовий зсув для нього $V = 34$ нм, що близько до експериментального значення.

В обох вінілогах аніонних барвників 3, 4 другий перехід пов'язаний в основному з делокалізованими МО: $S_2 \approx |VZMO \rightarrow HBMO+1\rangle$; а отже, він чітко проявляється експериментально як перший мінімум в спектрі

анізотропії. Обчислене значення вініленового зсуву становить $V = 16$ нм близьке до значення, отриманого зі спектрів анізотропії: ≈ 35 нм.

В нейтральних мероціанінах 1, 2 в другому та третьому переходах основний вклад вносять локальні МО: другий перехід – за участю вакантної орбіталі, НВМО+2, а третій – за участю заповненої ВЗМО-1. Тільки четвертий перехід, S_0

$\rightarrow S_4$, формується, як видно з таблиці 2, делокалізованими орбіталями: ВЗМО та НВМО+1, подібно до другого переходу в симетричних аніонних барвниках. Очевидно, саме цьому переходові відповідає перший мінімум в спектрі анізотропії збудження флюоресценції (рис. 3 барвник 1). Вініленовий зсув становить $V = 24$ нм.

Таблиця 2

Отримані довжини хвиль (λ), вініленові зсуви (V) і сили осциляторів (f) барвників 1-6

Барвник	n	Перехід	λ , нм	V, нм	f	Основні конфігурації
1	1	$S_0 \rightarrow S_1$	427		1.952	0.98 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО>
		$S_0 \rightarrow S_2$	319		0.068	0.88 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+2>
		$S_0 \rightarrow S_3$	310		0.057	0.81 ВЗМО-1 $\rightarrow$ НВМО>
		$S_0 \rightarrow S_4$	271		0.026	0.73 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+1>
2	2	$S_0 \rightarrow S_1$	464	37	2.409	0.97 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО>
		$S_0 \rightarrow S_2$	329	10	0.042	0.92 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+2>
		$S_0 \rightarrow S_3$	319	9	0.104	0.83 ВЗМО-1 $\rightarrow$ НВМО>
		$S_0 \rightarrow S_4$	285	14	0.106	0.93 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+1>
3	1	$S_0 \rightarrow S_1$	424		2.160	0.96 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО>
		$S_0 \rightarrow S_2$	305		0.000	0.89 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+1
		$S_0 \rightarrow S_3$	283		0.142	0.60 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+2 0.42 ВЗМО-1 $\rightarrow$ НВМО+1
		$S_0 \rightarrow S_4$	282		0.078	0.75 ВЗМО-1 $\rightarrow$ НВМО 0.39 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+1
4	2	$S_0 \rightarrow S_1$	477	53	2.721	0.96 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО>
		$S_0 \rightarrow S_2$	321	16	0.004	0.94 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+1
		$S_0 \rightarrow S_3$	294	11	0.008	0.90 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+2
		$S_0 \rightarrow S_4$	292	10	0.055	0.39 ВЗМО-2 $\rightarrow$ НВМО+1 0.90 ВЗМО-1 $\rightarrow$ НВМО
5	1	$S_0 \rightarrow S_1$	441		1.563	0.99 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО>
		$S_0 \rightarrow S_2$	308		0.021	0.95 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+1>
		$S_0 \rightarrow S_3$	306		0.009	0.97 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+2>
		$S_0 \rightarrow S_4$	253		0.069	0.96 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+3>
6	2	$S_0 \rightarrow S_1$	498	57	2.093	0.99 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО>
		$S_0 \rightarrow S_2$	316	8	0.009	0.90 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+2>
		$S_0 \rightarrow S_3$	315	9	0.022	0.93 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+3>
		$S_0 \rightarrow S_4$	287	34	0.057	0.90 ВЗМО $\rightarrow$ НВМО+1>

Висновки

Були виміряні спектри поглинання ряду мероціанінів і відповідних симетричних катіонних та аніонних барвників. Вперше визначені довжини хвиль, що відповідають переходам у перший збуджений стан.

Вперше були виміряні спектри анізотропії збудження флюоресценції мероціанінів 1, 2 та відповідних їм катіонних симетричних барвників

5, 6. На основі отриманих результатів було вперше визначено положення переходу у другий вищий збуджений стан.

Були залучені квантово-хімічні розрахунки для надання повної інтерпретації спектрів поглинання досліджених барвників.

Список використаних джерел

1. Cyanines during the 1990s: A Review / [A. Mishra, R. Behera, P. Behera та ін.]. // *Chemical Reviews*. – 1990. – №100. – С. 1973–2000.
2. Kulinich A. V. Merocyanine dyes: synthesis. structure, properties. / A. V. Kulinich, A. A. Ishchenko. // *Chemical Reviews*. – 2009. – №78. – С. 141–164.
3. Retting W. Merocyanines: polyene–polymethine transition in donor–acceptor-substituted stilbenes and polyenes. / W. Retting, M. Dekhtyar. // *Chemical Physics*. – 2003. – №293. – С. 75–90.
4. Molecular design of near infrared polymethine dyes: A review / [J. L. Bricks, A. D. Kachkovskii, Y. L. Slominskii та ін.]. // *Dyes and Pigments*. – 2015. – №121. – С. 238–255.
5. Marder R. S. Organic nonlinear optical materials: where we have been and where we are going / R. S. Marder. // *Chemical Communications*. – 2006. – С. 131–134.
6. Demchenko A. *Advanced Fluorescence Reporters in Chemistry and Biology I*. [Електронний ресурс] / A. Demchenko // Springer Series on Fluorescence. – 2010. – Режим доступу до ресурсу: <http://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-04702-2>.
7. Park J. W. Large-area OLED lightings and their applications / J. W. Park, D. C. Shin, S. H. Park. // *Semiconductor Science and Technology*. – 2011. – №26. – С. 34.
8. Nonlinear Absorption in a Series of Donor- π -Acceptor Cyanines with Different Conjugation Lengths / [L. A. Padilha, O. V. Webster, O. V. Przhonska та ін.]. // *Journal of Materials Chemistry*. – 2009. – №19. – С. 7503–7513.
9. Effect of chromophore elongation on linear and nonlinear optical properties of merocyanines derivatives of diethylaminocoumarin / [V. Y. Gayvoronsky, A. V. Uklein, A. O. Gerashev та ін.]. // *Journal of Molecular Structure*. – 2013. – №1045. – С. 191–198.
10. The nature of eElectron transitions in anionic dioxaborines, derivatives of aminocoumarin / A. O. Gerashev, M. P. Shandura, Y. P. Kovtun, O. D. Kachkovsky. // *Journal of Physical Organic Chemistry*. – 2009. – №21. – С. 419–425.

References

1. MISHRA, A., BEHERA, R., BEHERA, P., MISHRA, B., BEHERA, G., REZNIKOV, Y. (2000) Cyanines during the 1990s: A Review. *Chemical Reviews*. 100. p.1973-2000.
2. KULINICH, A. V., ISHCHEKNO, A. A. (2009) Merocyanine dyes: synthesis. structure, properties. *Chemical Reviews*. 78 (2). p.141-164.
3. RETTING, W. & DEKHTYAR, M. (2003) Merocyanines: polyene–polymethine transition in donor–acceptor-substituted stilbenes and polyenes. *Chemical Physics*. 293 (1). p.75-90.
4. BRICKS, J. L., KACHKOVSKII, A. D., SLOMINSKII, YU. L., GERASEV, A. O., POPOV, S. V. (2015) Molecular design of near infrared polymethine dyes: A review. *Dyes and Pigments*. 121. p.238-255.
5. MARDER, R. S. (2006) Organic nonlinear optical materials: where we have been and where we are going. *Chemical Communications*. p.131-134.
6. DEMCHENKO, A. (2010) *Advanced Fluorescence Reporters in Chemistry and Biology I*. [Online] Springer Series on Fluorescence. Available from: <http://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-04702-2>. [Accessed: 10th Sep 2015].
7. PARK, J. W., SHIN, D. C., PARK, S. H. (2011) Large-area OLED lightings and their applications. *Semiconductor Science and Technology*. 26(3). p.1-9.
8. PADILHA, L. A., WEBSTER, O. V., PRZHONSKA, O. V., PECALI, H. HU. D., ROSCH, J. L., BONDAR, A. O., GERASEV, A. O., KOVTUN, Y. P., SHANDURA, M., KACHKOVSKII, A. D., HAGAN, D. J., STRYLAND, E. W. V. (2009) Nonlinear Absorption in a Series of Donor- π -Acceptor Cyanines with Different Conjugation Lengths. *Journal of Materials Chemistry*. 19. p.7503-7513.
9. GAYVORONSKY, V. YA., UKLEIN, A. V., GERASEV, A. O., GARASHCHENKO, V., V., KOVTUN, Y. P., SHANDURA, M. P., KACHKOVSKY, O. D. (2013) Effect of chromophore elongation on linear and nonlinear optical properties of merocyanines derivatives of diethylaminocoumarin. *Journal of Molecular Structure*. 1045. p.191-198.
10. GERASEV, A. O., SHANDURA, M. P., KOVTUN, Y. P., KACHKOVSKY, O. D. (2008) The nature of eElectron transitions in anionic dioxaborines, derivatives of aminocoumarin. *Journal of Physical Organic Chemistry*. 21. p.419-425.

11. Gerashev A. O. Series of polymethine dyes derived from 2,2-difluoro-1,3,2-(2H)-dioxaborine of 3-acetyl-7-diethylamino-4-hydroxycoumarin / A. O. Gerashev, M. P. Shandura, Y. P. Kovtun. // *Dyes and Pigments*. – 2008. – №77. – С. 598–607.
12. Gaussian03, Revision B.05 / [M. J. Frish, J. W. Trucks, H. B. Schlegel та ін.]. – Pittsburgh: Gaussian, Inc, 2003.
13. Lakowicz J. R. Principles of Fluorescence Spectroscopy / J. R. Lakowicz. – New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, 1999. – (3).
14. Fabian J. TDDFT-calculations of Vis/NIR absorbing compounds / J. Fabian. // *Dyes and Pigments*. – 2010. – №84. – С. 36–53.
15. Karaca S. A computational study on the excited state properties of a cationic cyanine dye: TTBC / S. Karaca, N. Elmaci. // *Computational and Theoretical Chemistry*. – 2011. – №964. – С. 160–168.
16. Verdict: Time-Dependent Density Functional Theory “Not Guilty” of Large Errors for Cyanines / [D. Jacquemin, R. Valero, C. Adamo та ін.]. // *Journal of Chemical Theory and Computation*. – 2012. – №8. – С. 1255–1259.
17. Bach G. Cyanine dyes and related compounds. In *RODD's Chemistry of Carbon Compounds* / G. Bach, S. Dahne. – Amsterdam: Elsevier Science, 1997. – (2).
18. Orlandi G. Theoretical analysis of spectra of short polyenes / G. Orlandi, F. Zerbetto, M. Zgiersky. // *Chemical Reviews*. – 1991. – №91. – С. 867–891.
19. Electronic transitions in a series of 2-azaazulene polymethine dyes with different π -conjugation lengths / [O. V. Przhonska, H. S. Webster, J. L. Bricks та ін.]. // *Chemical Physics*. – 2013. – №411. – С. 17–25.
20. Electronic transitions in polymethine dyes involving local and delocalized levels / [O. O. Viniychuk, S. M. Levchenko, O. V. Przhonska та ін.]. // *Journal of Molecular Structure*. – 2014. – №1060. – С. 30–37.
11. GERASEV, A. O., SHANDURA, M. P., KOVTUN, Y. P. (2008) Series of polymethine dyes derived from 2,2-difluoro-1,3,2-(2H)-dioxaborine of 3-acetyl-7-diethylamino-4-hydroxycoumarin. *Dyes and Pigments*. 77. p.598-607.
12. FRISH, M. J., et al. (2003) *Gaussian03, Revision B.05*. Pittsburgh: Gaussian, Inc.
13. LAKOWICZ, J. R. (1999) *Principles of Fluorescence Spectroscopy*. 3rd Ed. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers.
14. FABIAN, J. (2010) TDDFT-calculations of Vis/NIR absorbing compounds. *Dyes and Pigments*. 84. p.36-53.
15. KARACA, S. & ELMACI, N. (2011) A computational study on the excited state properties of a cationic cyanine dye: TTBC. *Computational and Theoretical Chemistry*. 964. p.160-168.
16. JACQUEMIN, D., VALERO, R., ADAMO, C., CIOFINI, I., TRUHLAR, D. G. (2012) Verdict: Time-Dependent Density Functional Theory “Not Guilty” of Large Errors for Cyanines. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 8. p.1255-1259.
17. BACH, G., DAHNE, S. (1997) *Cyanine dyes and related compounds*. In *RODD's Chemistry of Carbon Compounds*. 2nd Ed. Amsterdam: Elsevier Science.
18. ORLANDI, G., ZERBETTO, F., ZGIERSKI, M. Z. (1991) Theoretical analysis of spectra of short polyenes. *Chemical Reviews*. 91. p.867-891.
19. PRZHONSKA, O. V., WEBSTER, H. HU. S., BRICKS, JU. L., VINIYCHUK A. A., KACHKOVSKI, A. D., SLOMISKY, YU. L. (2013) Electronic transitions in a series of 2-azaazulene polymethine dyes with different π -conjugation lengths. *Chemical Physics*. 411. p.17-25.
20. VINIYCHUK, O. O., LEVCHENKO, S. M., PRZHONSKA, O. V., KACHKOVSKI, O. D., BRICKS, YU. L., KUDINOVA, M. O. (2014) Electronic transitions in polymethine dyes involving local and delocalized levels. *Journal of Molecular Structure*. 1060. p.30-37.

Надійшла до редколегії 18.09.15

УДК 539.1

Петренко В.І.¹, к.ф.-м.н.,
Іваньков О.І.², к.ф.-м.н.,
Авдеєв М.В.³, д.ф.-м.н.,
Ніколаєнко Т. Ю.⁴, к.ф.-м.н.

Просторова структура рідинних систем на основі наночастинок магнетиту з органічним покриттям

^{1,4} Київський національний університет
імені Тараса Шевченка,
01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,
e-mail: tim_mail@ukr.net

^{2,3} Об'єднаний інститут ядерних досліджень,
141980, м. Дубна, вул. Жоліо Кюрі 6,
e-mail: ivankov@jinr.ru

V.I.Petrenko¹, Ph.D.,
O.I.Ivankov², Ph.D.,
M.V.Avdeev³, Dr.Sc.,
T. Yu. Nikolaienko⁴, Ph.D.

Spatial structure of liquid systems with organic-coated magnetite nanoparticles

^{1,4} Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: tim_mail@ukr.net,

^{2,3} Joint Institute for Nuclear Research, 141980,
Dubna, Joliot-Curie 6,
e-mail: ivankov@jinr.ru

Методом малокутового розсіяння нейтронів (МКРН) досліджено структуру магнітних рідинних систем на основі наночастинок магнетиту, поверхня яких модифікована олеатом натрію та хітозаном в полярному (вода) та неполярному (ксиліл) розчинниках. З'ясовано, що додавання до системи доксорубіцину не приводить до змін спектру МКРН зразків. Разом з тим, зміна розчинника з полярного на неполярний зменшує вміст агрегатів у системі. Отримані результати можуть бути корисними у розробці методів для приготування нанорідин, придатних для медичних застосувань.

Ключові слова: магнітні наночастинок, нанорідини, малокутове розсіяння нейтронів.

By a small-angle neutron scattering (SANS) method the structure of magnetic liquid systems containing magnetite nanoparticles coated with sodium oleate and chitosan in a polar (water) and non-polar (xylene) solvents has been investigated. Considerable fraction of aggregates has been detected in the water-based samples. At the same time, replacing the polar solvent with a non-polar one leads to a considerable decrease in a nanoparticle aggregates contents. It has been found that neither addition of small fraction of doxorubicin, nor that of ammonium leads to a detectable changes in a SANS spectrum. Therefore, binding of small drug molecules does not affect the particle surface structure significantly regardless of the solution pH. Fractal dimension exponents for the observed fractal aggregates have been estimated. The particles gyration radius has been found to be close to 7.5 nm and its value appeared insensitive to the type of the solvent. The obtained results can be useful for development of new methods for preparation of nanoliquids suitable for medicinal applications.

Key Words: magnetic nanoparticles, nanoliquids, small-angle neutron scattering

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Лікування найбільш загрозливих захворювань (зокрема, раку) вимагає розробки ефективних методів для спрямованого транспорту лікарських препаратів, завдяки якому здорові тканини не будуть піддаватися впливу молекул потенційно високотоксичних лікарських засобів [1]. Одним з методів досягнення необхідної концентрації молекул лікарського препарату виключно в невеликому околі заданої ділянки живого організму є використання наночастинок на основі оксиду заліза (магнетиту)

в ролі носіїв та керування їхнім рухом всередині організму за допомогою сильного неоднорідного магнітного поля зі специфічним просторовим розподілом напруженості [2]. Необхідними умовами для успішного застосування вказаного методу є дотримання певного розподілу (нано)частинок магнетиту за розмірами [3] та така модифікація поверхні частинок, яка забезпечує її біосумісність [4], але в той же час здатна утримувати на собі молекули лікарських засобів.

Існуючі дослідження [5, 6] показують, що

олеат натрію і хітозан є перспективними покриттями, що відповідають обом зазначеним вимогам і придатні для сполучення наночастинок магнетиту з молекулами протипухлинних препаратів (зокрема, доксорубіцину). При цьому особливістю природного полісахариду хітозану є значений вміст у ньому аміно- і гідроксильних груп, що уможливило великий спектр різних схем зв'язування молекул лікарських засобів із хітозановим покриттям поверхні частинки. Окрім того, хітозан характеризується високою біосумісністю, високою адгезією до поверхні та є стабільним в широкому діапазоні рН [5]. Перевагами ж органічних покриттів на основі олеату натрію є простота та дешевизна необхідних процедур синтезу.

Метою даної роботи є дослідження просторової структури рідинних наносистем на основі наночастинок з органічними покриттями та перевірка впливу на таку структуру складу буферного розчину та зв'язування із покриттям молекул лікарських засобів.

Матеріали і методи

Експеримент з малокутового розсіяння нейтронів (МКРН) проводився на установці ЮМО на імпульсному реакторі ІБР-2 Об'єднаного інституту ядерних досліджень (м. Дубна, РФ) з використанням дводетекторної системи [7]. Діапазон модуля вектора розсіяння нейтронів складав $0,06 \div 5 \text{ нм}^{-1}$. В одержаних кривих розсіяння було враховано поправки на фонове розсіяння від буферних розчинів. Для калібрування абсолютної величини інтенсивності розсіяння під час вимірювань було використано ванадієвий стандарт. При проведенні експериментів досліджувані рідинні системи вміщувалися у термостатовані кварцеві кювети з товщиною зразка 1 мм. Виміри проводили при кімнатній температурі

Для проведення досліджень було приготовано наступні зразки:

- 1) водний розчин наночастинок магнетиту (50 мг/мл), вкритих олеатом натрію,
- 2) розчин наночастинок магнетиту (50 мг/мл), вкритих олеатом натрію, у ксилолі,
- 3) наночастинки магнетиту (13 мг/мл), вкриті хітозаном, у водному розчині (1% ваг.) оцтової кислоти,
- 4) наночастинки магнетиту (13 мг/мл), вкриті хітозаном, у водному розчині (1% ваг.) оцтової кислоти з додаванням доксорубіцину (100 мкг на 1 мл зразка),
- 5) наночастинки магнетиту (13 мг/мл), вкриті

хітозаном, у водному розчині оцтової кислоти (1% ваг.) з невеликою часткою NH_4OH (25 мкл на мл зразка, до досягнення рН 10.0) і молекул доксорубіцину (100 мкг на 1 мл зразка).

Для визначення структурних характеристик зразків використовували апроксимацію Гін'є [8] для початкової ділянки експериментальних кривих МКРН (на якій $q_{\text{max}} R_g < 1$), яка надає інтегральні характеристики частинок в рідинній системі. Для цього виконували апроксимацію залежності інтенсивності розсіяння I від модуля переданого хвильового вектора q виразом

$$I(q) = I(0) \cdot \exp(-q^2 R_g^2 / 3), \quad (1)$$

де $I(0)$ – інтенсивність розсіяння в нульовий кут, яка пропорційна концентрації частинок в рідинній системі, квадрату об'єму частинки та контрасту, R_g – радіус інерції частинок, який визначається геометричними параметрами частинки і, у випадку сферичних частинок, з радіусом R_s , пов'язаний з останнім формулою [8]

$$R_g^2 = \frac{3}{5} R_s^2. \quad (2)$$

Проміжна ділянка МКРН графіка описувалась степеневою залежністю, з якої знаходили властивості поверхні досліджених систем. При визначенні фрактальної розмірності агрегатів апроксимацію залежності інтенсивності розсіяння I від модуля переданого хвильового вектора q здійснювали в області найменших значень останнього з використанням виразу

$$I = A \cdot q^{-\alpha}, \quad (3)$$

де показник степеня α має зміст фрактальної розмірності масових агрегатів (якщо $1 < \alpha < 3$), або поверхневих фракталів (якщо $3 < \alpha < 4$). Якщо $\alpha = 1$, то це свідчить про циліндричну форму об'єктів, $\alpha = 2$ відповідає розсіянню на так званих 2D об'єктах (ламерярні структури), тоді як $\alpha = 4$ відповідає гладкій сферичній поверхні.

Результати та обговорення

На рис. 1 наведено результати експерименту з МКРН для водних магнітних рідинних систем.

Слід відзначити, що незважаючи на те, що в цілому криві схожі між собою, МКРН сигнал для «базової» рідинної системи (зразок 1), що стабілізована олеатом натрію, відрізняється від усіх інших модифікацій досліджуваного феррофлюїда. В той же час, спектри МКРН для «модифікованих» рідинних систем (зразки 3–5) в межах похибки збігаються між собою, що вказує

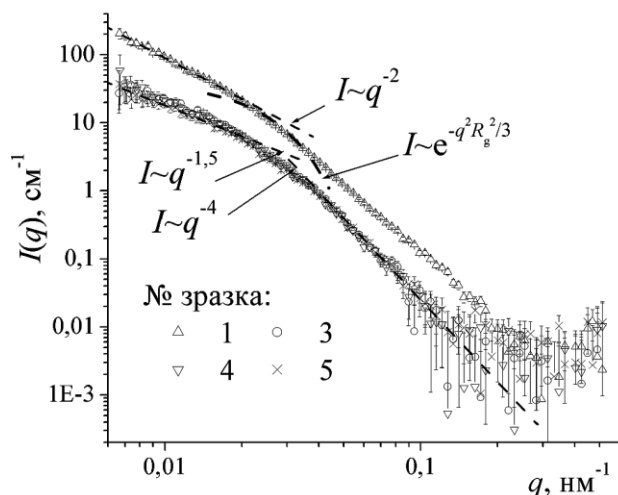


Рис. 1. Спектри МКРН магнітних систем на основі води: «базової» (зразок 1) та «модифікованих» (зразки 3–5). Пунктирними лініями показані апроксимація Гінье та степеневі закони розсіювання.

на те, що структура цих зразків на нанометровому масштабі однакова. Таким чином, ні додавання доксорубіцину, ані розчину NH_4OH до досліджуваної рідинної системи, не приводить до змін спектру МКРН зразків.

З аналізу даних МКРН можна зробити висновок, що в усіх водних магнітних рідинних системах разом з розсіюванням від «мономерних» частинок з радіусом інерції $R_g \approx 7,5$ нм спостерігаються порівняно великі агрегати (розміром понад 100 нм). Зафіксовано відмінність і в структурі агрегатів (початкова ділянка спектру МКРН) в «базовій» рідинній системі та «модифікованих»: у останніх відбувається перебудова агрегатів і їхня фрактальна розмірність (показник степеня на початковій частині МКРН кривої) стає рівною $\alpha \approx 1,5$ – на відміну від $\alpha \approx 2$ у агрегатів «базової» рідинної системи. Іншими словами, у зразків 3–5 агрегати є більш розгалуженими, аніж у зразку 1.

В області великих значень q спостерігається спадання інтенсивності МКРН з показником степеня 4, що відповідає розсіюванню на окремих полідисперсних частинках сферичної форми із гладкою поверхнею. Слід зазначити, що одержані результати МКРН узгоджуються із відомими даними [6] для подібних магнітних рідин та їхніх компонентів.

Використовуючи вираз (2) для отриманого вище значення радіусу інерції частинок ($R_g \approx 7,5$ нм), можна розрахувати радіус частинок за припущення, що форма частинок є сферичною. В результаті отримуємо середній радіус частинок

в розчині, що дорівнює $R_s \approx 9,7$ нм.

Незважаючи на те, що всі досліджені зразки водних ферофлюїдів суттєво агреговані, – про що свідчить зростання сигналу розсіювання в області найменших векторів розсіювання із згаданими вище показниками степеня, – спектр МКРН для ферофлюїду на основі ксилолу (рис. 2) свідчить про те, що така система є більш стабільною.

Дійсно, одержаний спектр відповідає розсіюванню на поодиноких, сильно полідисперсних частинках нанометрового розміру зі схожим до попередньому випадку радіусом інерції частинок: $R_g \approx 7,5$ нм.

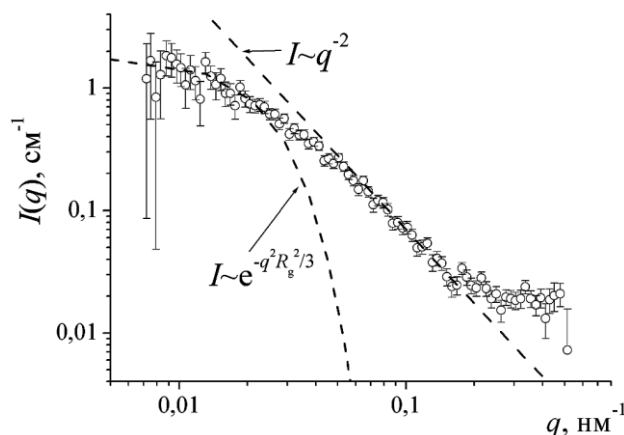


Рис. 2. Спектр МКРН для магнітної рідинної системи на основі ксилолу (зразок 2). Пунктирними лініями показані апроксимація Гінье та степеневий закон.

В області найменших значень q не спостерігається додаткового розсіювання і значення інтенсивності виходить на константу, що вказує на справедливість закону Гінье лише для наночастинок в діапазоні розмірів $1 \div 100$ нм.

Висновки

Узагальнюючи аналіз отриманих результатів експериментів з малокутового розсіювання нейтронів, можна сказати, що в усіх досліджених водних системах спостерігаються досить великі агрегати частинок. Разом з тим, модифікація початкового ферофлюїду (покриття частинок шаром хітозану) призводить до реорганізації агрегатів в системі.

Водночас, структура магнітної рідинної системи на основі ксилолу значно відрізняється від досліджених водних магнітних рідинних систем: сигналу від агрегатів в спектрі МКРН не спостерігається. Натомість, в спектрі присутній сигнал лише від розсіювання на полідисперсних поодиноких наночастинок.

В подальшому доцільно провести експеримент МКРН з використанням методики варіації контрасту (змінним співвідношенням H_2O / D_2O в системі), що дозволить визначити розподіл агрегатів за величиною довжини

розсіювання, якою вони характеризуються.

Роботу виконано в рамках теми молодих вчених Київського національного університету імені Тараса Шевченка №15БФ051-01.

Список використаних джерел

1. Localized doxorubicin chemotherapy with a biopolymeric nanocarrier improves survival and reduces toxicity in xenografts of human breast cancer / [S. Cai, S. Thati, T. R. Bagby et al.]. // *Journal of Controlled Release*. – 2010. – V.146. – P. 212–218.
2. Concentration-dependent toxicity of iron oxide nanoparticles mediated by increased oxidative stress / [S. Naqvi, M. Samim, M. Z. Abdin et al.]. // *International Journal of Nanomedicine*. – 2010. – V.5. – P. 983–989.
3. Albanese A. The Effect of Nanoparticle Size, Shape, and Surface Chemistry on Biological Systems / A. Albanese, P. S. Tang, W. C. Chan. // *Annual review of biomedical engineering*. – 2012. – V.14. – P. 1–16.
4. Bhattarai N. Chitosan-based hydrogels for controlled, localized drug delivery / N. Bhattarai, J. Gunn, M. Zhang. // *Advanced drug delivery reviews*. – 2010. – V. 62. – P. 83–99.
5. Synthesis and adsorption properties of chitosan-silica nanocomposite prepared by sol-gel method / [T. M. Budnyak, I. V. Pylypchuk, V. A. Tertykh et al.]. // *Nanoscale research letters*. – 2015. – V. 10. – P. 87.
6. Structure of water-based ferrofluids with sodium oleate and polyethylene glycol stabilization by small-angle neutron scattering: contrast-variation experiments / [M. V. Avdeev, A. V. Feoktystov, P. Kopcansky et al.]. // *Journal of Applied Crystallography*. – 2010. – V.43. – P. 959–969.
7. Kuklin A. I. Two-detector System for Small-Angle Neutron Scattering Instrument / A. I. Kuklin, A. K. Islamov, V. I. Gordeliy. // *Neutron News*. – 2005. – №16. – C. 16–18.
8. Feigin L. A. Structure Analysis by Small-Angle X-ray and Neutron Scattering / L. A. Feigin, D. I. Svergun. – New York: Plenum Press, 1987. – 335 p.

References

1. CAI, S., THATI, S., BAGBY, T. R., DIAB, H. M., DAVIES, N. M., COHEN, M. S. & FORREST, M. L. (2010) Localized doxorubicin chemotherapy with a biopolymeric nanocarrier improves survival and reduces toxicity in xenografts of human breast cancer. *Journal of Controlled Release*. 146(2), p. 212-218.
2. NAQVI, S., SAMIM, M., ABDIN, M. Z., AHMED, F. J., MAITRA, A. N., PRASHANT, C. K. & DINDA, A. K. (2010) Concentration-dependent toxicity of iron oxide nanoparticles mediated by increased oxidative stress. *International Journal of Nanomedicine*. 5, p.983–989.
3. ALBANESE, A., TANG, P. S. & CHAN, W. C. (2012) The Effect of Nanoparticle Size, Shape, and Surface Chemistry on Biological Systems. *Annual review of biomedical engineering*. 14, p.1-16.
4. BHATTARAI, N., GUNN, J. & ZHANG, M. (2010) Chitosan-based hydrogels for controlled, localized drug delivery. *Advanced drug delivery reviews*. 62(1), p. 83-99.
5. BUDNYAK, T. M., PYLYPCHUK, I. V., TERTYKH, V. A., YANOVSKA, E. S., & KOLODYNSKA, D. (2015). Synthesis and adsorption properties of chitosan-silica nanocomposite prepared by sol-gel method. *Nanoscale research letters*, 10(1), p.87.
6. AVDEEV, M. V., FEOKTYSTOV, A. V., KOPCANSKY, P., LANCZ, G., GARAMUS, V. M., WILLUMEIT, R. & BULAVIN, L. A. (2010) Structure of water-based ferrofluids with sodium oleate and polyethylene glycol stabilization by small-angle neutron scattering: contrast-variation experiments. *Journal of Applied Crystallography*. 43(5), p. 959-969.
7. KUKLIN, A.I., ISLAMOV, A.KH. & GORDELIY, V.I. (2005) Two-detector System for Small-Angle Neutron Scattering Instrument. *Neutron News*. 16(3), p. 16-18.
8. FEIGIN, L. A. & SVERGUN, D. I. (1987) *Structure Analysis by Small-Angle X-ray and Neutron Scattering*. New York: Plenum Press.

Надійшла до редколегії 10.09.2015

УДК 535.016:537.8

Рапопорт Ю. Г.¹, к. ф.-м. н., с. н. с.,
Бордман А. Д.², д. ф.-м. н., проф.

Yu.G. Rapoport¹, PhD., Sen. Sci. Res.,
A. D. Boardman², Dr. Sci., Prof.

Моделювання «від характеристик метачастинки до характеристик нелінійних хвиль в шаруватих активних бі-анізотропних метаматеріалах з об'ємними та поверхневими нелінійностями»

Modeling “from the characteristics of a metaparticle to the characteristics of nonlinear waves in layered active bi-anisotropic metamaterials with the volume and surface nonlinearities”

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,
e-mail: yuriy.rapoport@gmail.com

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st., 64/13,
e-mail: yuriy.rapoport@gmail.com

²Центр з досліджень матеріалів та фізики ім. Джоуля, університет Селфорду, M5 4WT UK (Велика Британія)
e-mail: A.D.Boardman@salford.ac.uk

²Joule Material & Physics Research Centre, University of Salford, M5 4WT UK
e-mail: A.D.Boardman@salford.ac.uk

Розвинутий «наскрізний» метод моделювання «від характеристик окремої метачастинки до характеристик нелінійних хвиль в бі-анізотропних шаруватих активних метаматеріалах з об'ємними та поверхневими нелінійностями» та досліджені нові хвильові ефекти в нелінійних активних гіротропних шаруватих структурах.

Ключові слова: нелінійні, хвилі, бі-анізотропні метаматеріали, шаруваті, активні середовища.

"Pass-through" method is developed for modeling "from characteristics of separate metaparticle to characteristics of nonlinear waves in layered bi-anisotropic active metamaterials with volume and surface nonlinearities". Method includes (1) modeling and characterization of separate, in general case, bi-anisotropic/chiral metaparticle (BIAMP) with nonlinear "load", based on consideration of corresponding nonlinear equivalent electric circuit; 2) nonlinear characterization of a media which includes such metaparticles; (3) developed method, which in this case can be considered as a method for the derivation of nonlinear evolution equations in layered structures (NEELS)[1], which allows modeling nonlinear wave propagation and corresponding wave effects. Numerical estimations demonstrate a great effectiveness of amplification of electromagnetic waves in active metamaterials with two types of "active loads", namely (a) split ring resonators (SRR) with active elements characterizing by negative differential conductivity and (b) BIAMP with nonlinear capacitive elements for a parametric three-wave amplification of two counter propagating electromagnetic pulses. New wave effects in gyrotropic active nonlinear structures with parametric coupling are investigated.

Key Words: nonlinear, waves, bi-anisotropic metamaterials, layered, active media.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Єжов С.М.

Вступ

Розвинутий «наскрізний» метод моделювання нелінійних хвиль в активних шаруватих «метаматеріальних» структурах включає (1) моделювання і характеризацію окремої (в загальному випадку бі-анізотропної « Ω - частинки»)/метачастинки (БІАМЧ) [1, 2] з «нелінійним навантаженням» на основі розгляду відповідної (нелінійної) еквівалентної

електричної схеми; (2) характеризацію нелінійного середовища, що включає такі метачастинки; (3) розвинутий метод, який є різновидом методу виведення нелінійних еволюційних рівнянь в шаруватих середовищах (НЕРШС) [1] для бі-анізотропного метаматеріалу і моделювання нелінійних хвиль, як таких, та відповідних хвильових ефектів. Можливе «надефективне» підсилення електромагнітних хвиль (ЕМХ) в активних середовищах з

кільцевими резонаторами з розривом (KPP), а також нелінійними активними БІАМЧ [1, 2]. Досліджені нові хвильові ефекти в нелінійних активних гіротропних шаруватих структурах.

Метод локальних струмів для гомогенізації метаматеріалу з бі-анізотропними метачастинками за межами «методу збурень»

Запропонований, наскільки нам відомо, вперше, підхід, для гомогенізації біанізотропного середовища, є принципово відмінним від методу збурень. Розглянемо бі-анізотропний метаматеріал, де всі БІАМЧ лежать в паралельних площинах і всі є паралельними/однаково орієнтованими (див. рис.1. а, б) [2]. Лінійна M_n^{lin} та нелінійна M_n^{nl}

складові магнітної поляризації, напрямлені паралельно нормалі до площини магнітної петлі (для всіх метачастинки в середовищі, що розглядається, цей напрямок є одним і тим же, який прийемо за z та позначеної індексом « n »), рис. 1. б. Лінійна P_l^{lin} та нелінійна P_l^{nl} складові електричної поляризації напрямлені вздовж «вусиків» (всіх) БІАМЧ (прийемо цей напрямок за x та позначимо індексом « l »). (див. рис. 1. а). Компоненти лінійної поляризуємості визначаються за допомогою представлення електричної та магнітної поляризації Ω -частинки (див. еквівалентну схему на рис. 1. б) через відповідні («локальні») струми, які визначаються «локальними полями» [1-3]:

$$\begin{aligned}\chi_{ee0}^{lin} &= (Nl^2 / i\omega)[(Z_{0cg}^{-1} + Z_{LN}^{-1}) / (Z_{an} Z_{00N}^{-1})] = (\chi_{ee0} f / A)(F_{me0} + F_{ee1}), \chi_{ee0} = \phi v_{res}^2 (L_{eff} / L)^{-1} \\ \chi_{mmn}^{lin} &= -i(NS^2 \omega / c^2)[(Z_{0cg}^{-1} + Z_{aN}^{-1}) / (Z_{Ln} Z_{00N}^{-1})] = (\chi_{mm0} \bar{\omega}^2 / A)(F_{me0} + F_{mm1}), \chi_{mm0} = \phi(L_{eff} / L)^{-1} \\ \chi_{ment}^{lin} &= -\chi_{emtn}^{lin} = (NLS / c) / (Z_{aN} Z_{LN} Z_{00N}^{-1}) = -(i\chi_{me0} f \bar{\omega} / A)F_{me0}, \chi_{me0} = \sqrt{\chi_{ee0} \chi_{mm0}}\end{aligned}\quad (1)$$

$$F_{me0} = 1 + i\psi \bar{\omega}, F_{mm1} = -i\psi \bar{\omega}(C_{N0} / C_{eff}), F_{ee1} = -(1 - f)\bar{\omega}^2 - i\psi \bar{\omega}^3 (C_{cg} / C_{eff}), \phi = NS^2 / c^2 L_{eff},$$

$$v_{res} = cl / S\omega_{res}, \bar{\omega} = \omega / \omega_{res}, \omega_{res}^2 = (L_{eff} C_{eff})^{-1}, L_{eff} = (L + L_1), C_{eff} = (C_{cg} + C_{N0} + C_{aeff})$$

$$C_{aeff} = (1 - C_a C_p^{-1})^{-1} C_a, L_1 = 4\pi S^2 N / (3\mu_{host} c^2), C_p^{-1} = 4\pi Nl^2 / (3\epsilon_{host}), A = 1 - \bar{\omega}^2 + iq\psi \bar{\omega}\quad (2)$$

$$q = [1 - \bar{\omega}^2 (1 - C_{N0} / C_{eff})], Z_{aN} = Z_a + i(C_p \omega)^{-1} = (i\omega C_{aeff})^{-1}, Z_a = (i\omega C_a)^{-1}, Z_{LN} = Z_L + i\omega L_1 = i\omega L_{eff}$$

$$Z_L = i\omega L, Z_{00N}^{-1} = Z_{0cg}^{-1} + Z_{aN}^{-1} + Z_{LN}^{-1}, Z_{0cg}^{-1} = Z_0^{-1} + Z_{cg}^{-1}, Z_0^{-1} = (i\omega C_{0N})^{-1}, Z_{cg}^{-1} = (i\omega C_g)^{-1}, f = C_{aeff} / C_{eff}$$

В (1), (2), A – резонансний знаменник, імпеданси Z_L, Z_{cg}, Z_a, Z_0 характеризують елементи еквівалентної схеми бі-анізотропної метачастинки (рис. 1. а, б); L, C_g, C_{N0}, C_a – індуктивність «магнітної петлі» та ємності зазору БІАМЧ, лінійної частини нелінійного елемента, поміщеного в зазорі та «вусиків» електричного диполу, що входить в склад БІАМЧ, відповідно; ефективні індуктивність та обернена ємність, L_1, C_p^{-1} включають «колективний ефект» взаємодії між метачастинками у наближенні Максвелла-Гарнета [1-3]; ψ – параметр

дисипативних втрат; N, c, l – концентрація БІАМЧ, швидкість світла в вакуумі, та довжина металевих «вусиків» БІАМЧ, відповідно. S та L_{eff} – площа та ефективна індуктивність магнітної петлі бі-анізотропної частинки, відповідно, що включає вклад ефекту взаємодії між частинками; $\bar{\omega}, \omega, \omega_{res}$ – нормована частота, частота електромагнітного поля і резонансна частота метаматеріалу з БІАМЧ (отримана, наскільки нам відомо, вперше в явному вигляді), відповідно. Для нелінійних поляризацій отримані формули [1, 2], які включають елементи нелінійних поляризуємостей/сприйнятливостей:

$$\begin{aligned}P_{NLl} &= \chi_{ee}(|F|^2)E_l + \chi_{em}(|F|^2)H_n, M_{NLn} = \chi_{me}(|F|^2)E_l + \chi_{mm}(|F|^2)H_n, \chi_{mm}(|F|^2) = -\phi(1 + i\psi \bar{\omega})G(|F|^2), \\ \chi_{ee}(|F|^2) &= -\phi v_{res}^2 \bar{\omega}^2 (1 + i\psi \bar{\omega})G(|F|^2), \chi_{me}(|F|^2) = -\chi_{em}(|F|^2) = -i\phi v_{res} f \bar{\omega} (1 + i\psi \bar{\omega})G(|F|^2)\end{aligned}\quad (3)$$

$$\begin{aligned}R &\equiv |U_N^{(1)}|^2; G(|F|^2) = [A(A + BR(|F|^2))]^{-1} \times BR(|F|^2), F = q_l E_l + q_n H_n \equiv f \bar{\omega}^2 \bar{u}_l + i\bar{\omega} \bar{H}_n, \bar{u}_l = lE_l / U_{0k}, \\ \bar{H}_n &= v^{-1}(lH_n / U_{k0}); \bar{U}_N^{(1)}(A + B|\bar{U}_N^{(1)}|^2) = -F; |B|^2 R^3 + 2\text{Re}(AB^*)R^2 + |A|^2 R - f^2 |F|^2 = 0\end{aligned}\quad (4)$$

В (4), $v = v_{res} / \bar{\omega}$, $B = -\bar{\omega}^2 [\alpha_{N1} q_2 + (1/2) \alpha_{N2}]$,
 $q_2 = \alpha_{N1} \bar{\omega}^2 \{1 - 4\bar{\omega}^2 + 2i\bar{\omega}[1 - 4\bar{\omega}^2(1 - C_{N0} / C_{eff})]\}^{-1}$;
 $q_{l,n}$ - коефіцієнти в лінійній комбінації
електричного та магнітного полів, що входить в
 F та визначає компоненти діад нелінійних
сприйнятливостей (3); ці коефіцієнти легко
знайти з (4). В (4) входять дві еквівалентні
форми рівняння для визначення $R \equiv |U_N^{(1)}|^2$, $U_N^{(1)}$ -
(комплексна) амплітуда основної (першої)
гармоніки напруги на нелінійному елементі
 $C = C(U)$ (рис. 1. а, б). Тут нелінійний/активний
елемент навантаження БІАМЧ вважається
ємнісним (діод, див. [3] та посилання в [3]). Для
нелінійних струму I_N , заряду q_N та напруги U_N
маємо $I_N = dq_N / dt = [C_{0N} + C_{1N}(U_N / U_{0k}) +$
 $C_{2N}(U_N / U_{0k})^2] dU_N / dt$; $\alpha_{N1} \equiv C_{1N} / C_{eff}$,
 $\alpha_{N2} \equiv C_{2N} / C_{eff}$; U_{0k} - характерна напруга.

Нелінійні електромагнітні хвилі з параметричною взаємодією.

Якщо амплітуда хвилі накачки на частоті
 2ω не залежить від координати Y , умови
параметричного синхронізму двох зустрічних
імпульсів, що поширюються у
метаматеріальному хвильоводі в напрямку Y з
частотами $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ та хвильовими числами
 $\vec{k}_1 = -\vec{k}_2$ при наявності квадратичної нелінійності
мають вигляд $2\omega = \omega + \omega$, $0 = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$. Отримана
система рівнянь [1, рівн. (27)] забезпечує
можливість моделювання зустрічних хвиль з
амплітудами $A_{1,2}$ в бі-анізотропному нелінійному
хвильоводі/шаруватому середовищі з
урахуванням квадратичної нелінійності (і
параметричного підсилення), та ефектів
самовпливу, при наявності нелінійностей, що
відповідають широкому класу нелінійних
функцій. Рівняння виведені за допомогою
розвинутого загального методу для хвиль в
шаруватій системі зі слабкими (об'ємною та/або
поверхневою) нелінійностями [1, рівн. (6)] (метод
НЕРШС). Показана принципова можливість
параметричного підсилення (2+1)
квазісолітонних імпульсів в біанізотропних
шаруватих середовищах (рис. 1). Використовуючи [1, рівн. (27)], отримуємо, за
порядком величини, при $\partial / \partial y = 0$, $\partial / \partial z = 0$, та

нехтуючи ефектами самовпливу, $\partial A_{1,2} / \partial t \sim$
 $PAR_{TM}^{(0)}(\omega A_{2,1}^*)$;
 $PAR_{TM}^{(0)} = iQ_0 A_3$; $PAR_{TM}^{(0)} \sim \alpha_{N1} \times$
 $\times [(1 - 4\bar{\omega}^2) |1 - \bar{\omega}^2|^{1/2} \times (1 + L_1 / L)]^{-1} \times$
 $\times 8\pi v_{res}^2 \chi \bar{\omega}^4 I_0 (S\omega_{res} / c\phi_k) A_3$. Тут $I_0 = 2/3$,
 $\phi_k = 0.5 B$ - «масштаб» електричного потенціалу,
 μ_{host} - магнітна проникність «вміщуючого
середовища», в яке введені БІАМЧ. Оцінюємо
для ТМ мод падаючих хвиль; враховуючи
симетрію компонент полів, отримуємо
 $PAR_{TM}^{(0)} \neq 0$ для БІАМЧ, розташованих тільки в
одній, (наприклад, нижній) половині хвильоводу
[1] (рис. 1 в); покладемо (див. [1-3] і посилання в
цих роботах) $\omega_{res} \sim 1.25 \cdot 10^{11} s^{-1}$, $\alpha_{N1} \sim 10^{-2}$
 $\bar{\omega} \sim 1$, $|1 - \bar{\omega}^2| \sim 10^{-2}$, $I_0 \equiv S\omega_{res} / c \sim 3 \cdot 10^{-2} cm$,
 $r_0 \sim 0.05 cm$, $S = \pi r_0^2 \sim 7.5 \cdot 10^{-3} cm^2$, $N \sim 200 cm^{-3}$,
(амплітуда накачки) $A_3 \sim 1.5 A / m$. Така
амплітуда відповідає помірній накачці з
напруженістю магнітного поля $\sim 2 \cdot 10^{-2} E(Oe)$.
При $|A_1| \sim |A_2|$, величина ефективного «часу
підсилення» t_{char} за порядком величини є такою
ж, як період огинаючої сигнального імпульсу,
 $\omega t_{char} \sim 1$. Це означає дуже високу ефективність
параметричної взаємодії. При якісних чисельних
розрахунках (рис. 1 з), врахована кубічна
дефокусуюча нелінійність. Падаючий
«сигнальний» імпульс має ширину, близьку до
такої для структури на рис.1 з, нормовану
інтенсивність ~ 0.3 та «дзвіноподібну» форму
розподілу по ширині. Для виявлення умови
лінійного підсилення електромагнітних хвиль
(EMX) в активному метаматеріалі, де активні
навантаження включені в КРР, використовуємо
[1, рівн. (6)] для метаматеріалів з метачастинками
у формі КРР у лінійному наближенні. Отримуємо
«ефективну довжину» або обернений
просторовий інкремент підсилення EMX [3]:
 $L_{ampl} = 2k_y [\varepsilon k_0^2 (-\mu_{eff0}^*)]^{-1}$ або
 $L_{ampl} / \lambda \sim \sqrt{\mu_{eff0}^* / \varepsilon} [(-\mu_{eff0}^*) \pi]^{-1}$, де $\lambda = 2\pi / k_y$;
магнітна проникність μ дорівнює $\mu \equiv \mu' + i\mu''$, де
 μ', μ'' - дійсна та уявна частини μ , відповідно.
Зробимо оцінку для таких параметрів
метаматеріалу та «активної провідності»
($g_0 \equiv 1 / R_D < 0$) діоду Ганна/«активного
навантаження» [3] КРР: $\omega = 2\pi \cdot 10^{10} s^{-1}$,

$C_{eff} \sim 4.3 \cdot 10^{-2} \text{ pF}$, $|g_0| \sim 6.25 \cdot 10^{-7} \text{ Ом}^{-1}$,
 $S_D \sim 1 \text{ мкм}^2$, $R_L \sim 0.1 \text{ Ом}$, $R_{eff} \gg R_L + g_0(\omega C_g)^2 \sim$
 $(-0.25) \cdot 10^{-2} \text{ Ом}$, $N \sim 200 \text{ см}^{-3}$, $\varepsilon \sim -2$. Тут S_D -
ефективна площа поперечного перерізу
активного кристалу в діоді (зокрема, GaAs) [2, 3].

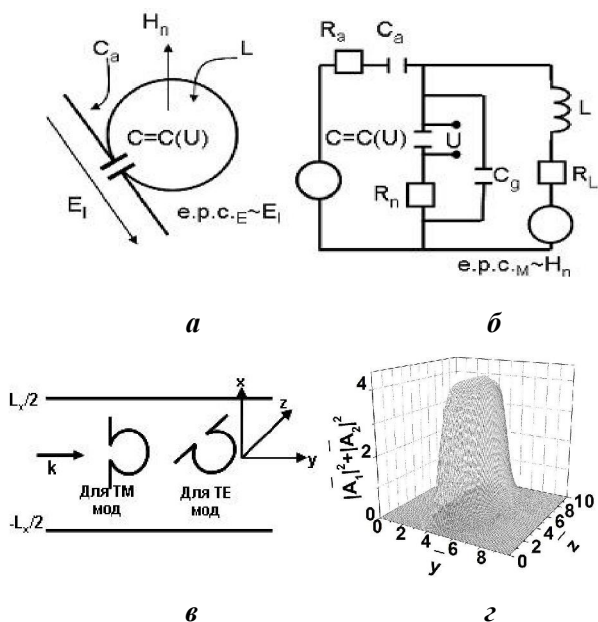


Рис. 1. а- бі-анізотропна Ω - частинка/БІАМЧ; б – еквівалентна схема БІАМЧ, ліва та права частини якої характеризують електричний та магнітний диполі з відповідними електрорушійними силами (е. р. с.), див. [1-3] та посилення в цих роботах; в - бі-анізотропний плоский хвильовод; всі БІАМЧ розміщені однаково і в одній/паралельних площинах; з-

сумарна інтенсивність «сигнального» імпульсу та зустрічного «імпульсу холостого ходу», з параметричною накачкою; координати Y, Z та інтенсивність подані у відносних одиницях.

Отримуємо [1,3] $\mu_{eff0}' \sim -1$,
 $|\mu_{eff0}''/\mu_{eff0}'| \sim 10^{-2}$; $L_{ampl}/\lambda \sim 30$. Маємо активне середовище, де можуть поширюватися ЕМХ з підсиленням, і з амплітудами, що змінюються повільно. При збільшенні $S_D \sim 70 \text{ мкм}^2$, отримуємо можливість «надефективного» підсилення ЕМХ в активному метаматеріалі з «негативною фазовою поведінкою», а саме $|\mu_{eff0}''/\mu_{eff0}'| \sim 0.3$, $L_{ampl}/\lambda \sim 1$, що і означає «надвисоку» ефективність підсилення.

Нові хвильові ефекти в нелінійних активних гіротропних шаруватих структурах

Розглянемо двовимірні імпульси в гіротропних активних нелінійних середовищах. Застосування методу НЕРШС до магнітостатичних хвиль (МСХ) в гіротропних шарах/феритових плівках (товщиною L) при наявності параметричної взаємодії, зокрема для обернених об'ємних МСХ (ООМСХ, див. [4], а також рис. 1 в роботі [1]) призводить до еволюційного рівняння в диференціальній формі [1, 4] $\partial/\partial x_i P_i + \partial/\partial t W_{1,1l} = F_{NL1} + F_{PAR}$, де $F_{PAR} = \gamma h_0 (h_{1ly}^* m_{2lx}^* - h_{1lx}^* m_{2ly}^*)$,

$$P_i = 1/(4\pi) \text{div} \{ [\varphi_{1l}^* \vec{b}_1] + [\varphi_1 \vec{b}_{1l}^*] \}_i + \alpha [(\partial m_{1x}/\partial t)(\partial m_{ilx}^*/\partial x_i) + (\partial m_{ilx}^*/\partial t)(\partial m_{1x}/\partial x_i) + (\partial m_{1y}/\partial t)(\partial m_{ily}^*/\partial x_i) + (\partial m_{ily}^*/\partial t)(\partial m_{1y}/\partial x_i)], F_{PAR} = \gamma h_0 (h_{1ly}^* m_{2lx}^* - h_{1lx}^* m_{2ly}^*)$$

$$W_{1,1l} = 1/(4\pi) (\varepsilon \vec{e}_1 \vec{e}_{1l}^* + \vec{h}_1 \vec{h}_{1l}^*) + (4\pi \omega_H / \omega_M) (m_{1x} m_{1lx}^* + m_{1y} m_{1ly}^*) + \alpha [(\partial m_{1x}/\partial x_i)(\partial m_{ilx}^*/\partial x_i) + (\partial m_{1y}/\partial x_i)(\partial m_{ily}^*/\partial x_i)] + \beta_S (m_{1x} m_{1lx}^*),$$

$$F_{NL1} = -i \omega \{ (4\pi\gamma / \omega_M) [m_{1ly}^* (\delta m_{x11} + \delta m_{x12}) + m_{1lx}^* (\delta m_{y11} + \delta m_{y12}) + h_{1lz}^* (m_{1z} + m_{2z})] \}$$

В (5), γ , $\omega_{H,M}$ - гіромагнітне відношення, циклотронна частота γH_0 та $4\pi\gamma M_0$, відповідно, H_0, M_0 - постійне магнітне поле та намагніченість насичення, відповідно (див. [1, 4] та посилення в цих роботах); змінне поле $\vec{h}$ МСХ визначається через магнітостатичний потенціал φ як $\vec{h} = -\vec{\nabla}\varphi$, $|\vec{e}| \rightarrow 0$ для МСХ. «Сигнальна» та «хвиля/імпульс холостого ходу» позначені індексами «1» та «2», відповідно, $\vec{m}$ та $\vec{b}$ -

намагніченість та магнітна індукція для відповідних хвиль. Отримане рівняння описує еволюцію 1-ї (сигнальної) хвилі, і аналогічне рівняння записується для зустрічної хвилі «холостого ходу» (індекс «2»). Індекси «1l» та «2l» позначають відповідні лінійні хвилі [1, 4]. Для ООМСХ хвиля з індексом «1» має амплітуду, що повільно змінюється в часі та просторових напрямках Y та Z (які лежать в площині феритової плівки товщини L). Член F_{PAR} описує

параметричну взаємодію (див. [1, 4] та посилання в цих роботах) хвиль сигнальної та холостого ходу, h_0 - амплітуда хвилі накачки. Групова швидкість $\vec{V}_g$ пакету ООМСХ, $\vec{H}_0$ та поле накачки $\vec{h}_0$ направлені вздовж Z. Накачка має частоту 2ω , сигнальна та зустрічна ООМСХ мають частоту ω та однакові за модулем хвильові числа $\pm k_z$ [1, 4]; α , β_s характеризують обмінну взаємодію та поверхневу одновісну анізотропію, відповідно. Член F_{NL1} описує нелінійність, що діє на хвилю 1 за рахунок (1) самовпливу

$$\delta m_{x11} = \gamma(\tilde{h}_{y1} m_{z1} - \tilde{h}_{z1} m_{y1})^{(1)}, \delta m_{y11} =$$

$$\gamma(\tilde{h}_{x1} m_{z1} - \tilde{h}_{z1} m_{x1}) \text{ та (2) крос-взаємодії з хвилею}$$

$$2, \delta m_{x12} = \gamma(\tilde{h}_{y2} m_{z1} - \tilde{h}_{z2} m_{y1})^{(1)} + \gamma(\tilde{h}_{y1} m_{z2} - \tilde{h}_{z1} m_{y2})^{(1)};$$

$$\delta m_{y12} = \gamma(\tilde{h}_{x2} m_{z1} - \tilde{h}_{z2} m_{x1})^{(1)} + \gamma(\tilde{h}_{x1} m_{z2} - \tilde{h}_{z1} m_{x2})^{(1)}$$

«Тильди» над позначеннями компонент (ефективних) магнітних полів означають включення до відповідних компонентів вкладів від обмінної взаємодії та поверхневої анізотропії; верхній індекс «1» означає виділення у відповідних членах, з урахуванням (нелінійних) 0-ї та 2-ї гармонік та нелінійних граничних умов для них, компонентів на частоті (ω) основної гармоніки (див. [1, 4]). В результаті інтегрування еволюційного рівняння в диференціальній формі по нормалі до структури (X для ООМСХ), в параболичному наближенні отримуємо .

$$\begin{aligned} & \partial U_1 / \partial t + V_{g1} \partial U_1 / \partial z + (i/2)(\partial^2 \omega / \partial k_z^2)(\partial^2 U_1 / \partial z^2) + i \partial \omega / \partial (k_y^2)(\partial^2 U_1 / \partial y^2) = \\ & F_{NLV} + F_{NLS} + F_{PAR}; F_{NLV} = F_{NLVx} + F_{NLVy} + F_{NLz}; F_{PAR} = (1/W_{V1}) \int_{-L/2}^{L/2} F_{PAR} dx. \\ & F_{NLVy} = -(1/W_{V1})(4\pi\gamma/\omega_M) i \omega \int_{-L/2}^{L/2} m_{1y}^* (\delta m_{x11} + \delta m_{x12}) dx, \\ & F_{NLVz} = -(1/W_{V1})(4\pi\gamma/\omega_M) i \omega \int_{-L/2}^{L/2} [\tilde{h}_{1z}^* (m_{1z} + m_{2z})]^{(1)} dx, \\ & F_{NLx} = -(1/W_{V1})(4\pi\gamma/\omega_M) i \omega \int_{-L/2}^{L/2} m_{1x}^* (\delta \tilde{m}_{y11} + \delta \tilde{m}_{y12}) dx + \\ & (1/W_{V1})(4\pi\gamma/\omega_M) i \omega \alpha \int_{-L/2}^{L/2} (\partial m_{1x} / \partial x) \{ \partial [(m_{1z} + m_{2z}) m_{2x}^*] / \partial x \} dx, W_{V1} = \int_{-\infty}^{\infty} W_{1,1/0} dx \end{aligned} \quad (6)$$

Рівн. (6) відповідає [(4), рівн. (7)], а у випадку відсутності параметричної взаємодії зводиться до [(1), рівн. (8)] (див. також посилання в [1, 4]). Тут амплітуда U_1 , що повільно змінюється, визначається так:

$\phi_1 = (1/2)U_1(t, z, y)f(x)\exp[i(\omega t - k_z Z)] + c.c.$, де $f(x)$ - функція, що описує розподіл магнітостатичного потенціалу для лінійної ООМСХ вздовж напрямку, нормального (X) до феритової плівки [4]. В (6), $W_{1,1/0}$ отримано підстановкою величин з індексом "1" замість величин з індексом "1" у вираз для $W_{1,1/0}$ у відповідному зі співвідношень (5).

Замітимо, що величини $\delta \tilde{m}_{y11; y12}$ можуть бути отримані з величин $\delta m_{y11; y12}$ шляхом заміни

$\tilde{h}_{x1,2} \rightarrow \tilde{\tilde{h}}_{x1,2}$; $\tilde{\tilde{h}}_{1,2x} \equiv h_{1,2x} + \alpha (\partial^2 / \partial y^2 + \partial^2 / \partial z^2) m_{1,2x}$. Член F_{NLS} , що описує поверхневу нелінійність, пов'язану з наявністю ефекту нелінійності в просторовій дисперсії і відповідних «додаткових граничних умовах», детально розглянутий в [4, 1]. Для безобмінних ООМСХ з параметричною взаємодією, з (6) (та аналогічного рівняння для амплітуди огинаючої зустрічного імпульсу) отримуємо систему рівнянь у вигляді [1, рівн. (26)] (див. також посилання в [1, 4]). Для безобмінних ООМСХ у відсутності параметричної взаємодії, член, що описує «об'ємну» нелінійність в (6), приймає вигляд .

$$\begin{aligned} & F_{NLV} = -iN^{(0)}_{BVMSW} |U_1|^2 U_1, N^{(0)}_{BVMSW} = -\partial \omega / \partial |U_1|^2 \equiv -\Delta \omega_{NL} / |U_1|^2 \approx (16\pi^2 M^2 \omega_H)^{-1} \omega \omega_M (1 - \mu) \times \\ & \{1 + [(\mu - 1)^2 + \mu_a^2]^{-1} (\omega_M / \omega_H)\}^{-1} \left[\int_0^l (\partial f(x) / \partial x)^2 dx \right]^{-1} \int_0^l (\partial f(x) / \partial x)^4 dx > 0; \\ & \mu_a = -\omega_M \omega / (\omega^2 - \omega_H^2); \mu = (\omega^2 - \omega_{\perp}^2) / (\omega^2 - \omega_H^2); \omega_{\perp}^2 = \omega_H (\omega_H + \omega_M) \end{aligned} \quad (7)$$

При $\omega_H \sim \omega_M$, $|k_z|L \ll 1$, отримуємо з (7), за порядком, $N_{BVMSW}^{(0)} \sim [(4\pi M_0)^2 l^2]^{-1} (\omega \omega_M / 4\omega_H)$. Для інших типів МСХ (прямих об'ємних та поверхневих (ПМСХ)) нелінійні коефіцієнти наведені в [4, рівн. (14)-(16)] і показано, що, за порядком величини, значення нелінійних коефіцієнтів для ООМСХ та ПМСХ відповідають тим, що наведені в роботах інших авторів; еволюційне рівняння, що описує вищі нелінійні дисперсію та дифракцію та вищі лінійні ефекти наведене в [4, рівн. (12)]; відмітимо, що булети [1, 4] в метаматеріалах з негативною фазою [2, 3] можуть формуватися при позитивних знаках коефіцієнтів $g_{1,2}, N$ в [4, рівн. (12)]; метод НЕРШС для електромагнітних хвиль в гіротропних середовищах з поверхневими нелінійностями див. в [4]. У випадку параметричної взаємодії отримані нові ефекти: (1) формування нових типів «ножеподібних булетів» [1, 4] у «вузьких» феритових хвильоводах; (2) для відносно невеликих величин амплітуд вхідного імпульсу та великих значень поля накачки, інтегральні інтенсивності сигнального та імпульсу «холостого ходу» мають тенденцію до зрівнювання після закінчення дії накачки (система «забуває»

початкові умови); (3) для помірних значень амплітуд вхідного імпульсу та відносно малої величини поля накачки, поперечне розщеплення хвилі «холостого ходу» пояснюється «нелінійною фазовою розстройкою».

Висновки

«Наскрізний» метод моделювання хвиль в активних нелінійних структурах (застосовний і для ТГц та оптичного діапазонів) включає: (1) характеристизацію окремої БІАМЧ з «нелінійним навантаженням», (2) нову нелінійну характеристизацію метаматеріалу, (3) метод НЕРШС для бі-анізотропного середовища. Ефективними є параметричне підсилення зустрічних імпульсів та лінійне підсилення в метаматеріалах з БІАМЧ, навантаженими на нелінійні ємнісні елементи та з КРР, навантаженими на діоди (Ганна) з негативною диференційною провідністю [3], відповідно. В гіротропних нелінійних активних шаруватих структурах отримані нові типи «ножеподібних булетів» у «вузьких» хвильоводах та пояснені нові нелінійні ефекти при формуванні активних хвильових структур.

References

1. Рапопорт Ю.Г. Загальний метод для виведення еволюційних рівнянь та моделювання нелінійних хвиль у шаруватих активних середовищах з об'ємними та поверхневими нелінійностями / Ю. Г. Рапопорт // Вісник Київського Національного Університету імені Тараса Шевченка. Серія фіз.-мат. науки. – 2014. – №1. – С. 281–288.
2. Boardman A.D. Weakly nonlinear waves in layered bi-anisotropic metamaterials / A.D. Boardman, R. Mitchell-Thomas, Yu.G. Rapoport // Proc. of 3rd Intern. Congr. on Adv. Electromagn. Mater. in Microwaves and Optics: Metamaterials-2009. London, UK. – 2009. - P. 495-497.
3. Boardman A.D. Creating stable gain in active metamaterials / A.D. Boardman, Yu.G. Rapoport, N. King, V.N. Malnev // J. Opt. Soc. Am. B. – 2007. - V. 24. - No. 10. – P. A53-A61.
4. Rapoport Yu. Метод для виведення нелінійних еволюційних рівнянь в шаруватих структурах (НЕРШС): приклад нелінійних хвиль в гіротропних шарах / Yu. Rapoport, V. Grimalsky, C. Zaspel // Вісник Київського Національного Університету імені Тараса Шевченка. Серія Фізика. – 2012. – №14/ 15. – С. 72–76.
1. RAPOPORT, YU.G. (2014) General method for the derivation of the evolution equations and modeling nonlinear waves in active layered structures with surface and volume nonlinearities. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Physics & Mathematics*. (1). p. 281–288.
2. BOARDMAN, A.D., MITCHEL-THOMAS, R., RAPOPORT, YU.G. (2009) Weakly nonlinear waves in layered bi-anisotropic metamaterials. In *3rd Intern. Congr. on Adv. Electromagn. Mater. in Microwaves and Optics: Metamaterials-2009*. 30th Aug. to 4th Sept. 2009. London. pp. 495-497.
3. BOARDMAN, A.D., RAPOPORT, YU.G., KING, N., MALNEV, V.N. (2007) Creating stable gain in active metamaterials. *J. Opt. Soc. Am. B*. 10. p. A53-A61.
4. RAPOPORT YU., GRIMALSKY V., ZASPEL. C. (2012) Method for the derivation of nonlinear evolution equations in layered structures (NEELS): an example of nonlinear waves in gyrotropic layers. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Physics*. 14/15. p. 72–76.

Надійшла до редколегії 26.06.15

УДК 519.9

Стебленко Л. П.¹, д.ф.-м.н., с.н.с.,
Ященко Л. М.², к.х.н., с.н.с.,
Воронцова Л. О.², м.н.с.,
Курилюк А. М.¹, к.ф.-м.н., н.с.,
Кобзар Ю. Л.¹, к.ф.-м.н., н.с.,
Науменко С. М.¹, пров. інж.,
Кріт О. М.¹, к.ф.-м.н., м.н.с.
Калініченко Д. В.¹, стажист

Зміна структури та мікроемеханічних характеристик епоксиретанових композитів, обумовлена способом введення наповнювача та його концентрацією в полімерній матриці

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,
e-mail: ¹kurylyuk_a2008@ukr.net,
²Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, 79000, м. Київ, Харківське шосе, 48,
e-mail: ²la.voronzova@gmail.com

L. P. Steblenko¹, Dr. Sci., Sen. Sci. Res.,
L. M. Yashchenko², PhD, Sen. Sci. Res.,
L. O. Voronzova², Sci. Res.,
A. M. Kuryliuk¹, PhD, Sci. Res.,
Yu. L. Kobzar¹, PhD, Sci. Res.,
S. M. Naumenko¹, Eng.
A. M. Kryt¹, PhD, Sci. Res.,
D. V. Kalinichenko¹, Eng.

The changes in the structure and micromechanical characteristics of epoxyurethane composites caused by the method of adding of filler and its concentration in the polymer matrix

¹Faculty of Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv, vul. Volodymyrska 64/13, Kyiv, 01601 Ukraine
²Institute of Macromolecular Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine, Harkivske shose, 48, 02160, Kyiv, Ukraine
e-mail: ²la.voronzova@gmail.com

У роботі досліджується вплив умов синтезу на особливості зміни структури і мікроемеханічних характеристик епоксиретанових полімерів, що містять наповнювач (полісилоксанові частинки) (ПСЧ). Встановлено, що в досліджених зразках полісилоксановмісних епоксиретанів структурна еволюція корелює зі змінами мікротвердості.

Ключові слова: епоксиретанові полімери, полісилоксанові частинки, мікротвердість.

The influence of synthesis conditions on the structure changes and micromechanical characteristics of epoxyurethane polymers containing inorganic filler (polysiloxane particles) is researched. It is established that microhardness as micromechanical structure-sensitive characteristics depends on the size and density of location of polysiloxane particles in the polymer matrix. It is shown that the structure of filled epoxyurethane, in the synthesis of which physical relationship with polysiloxane particles is established (nEU-2), is characterized by greater density and large size of the filler particles, as compared to the structure of the compositions, in the synthesis of which the formed polysiloxane particles have chemical bond with the matrix (nEU-1). The correlation between structural evolution in the samples and changes in microhardness, which serves as a structure-sensitive characteristics was found. It was established that both variants of the synthesis are characterized by growth relative microhardness with increasing concentration of polysiloxane particles. In the polymer compositions nEU-2 observed a substantial increase of relative microhardness in compared with polymer compositions nEU-1.

Key Words: epoxyurethane polymers, polysiloxane particles, microhardness

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

У даний час полімери інтенсивно використовуються для багатьох практичних цілей. Зокрема, розширюються можливості

використання полімерних матеріалів в мікроелектроніці [1,2]. Істотним напрямком, пов'язаним із застосуванням полімерів, є напрям, що розробляє захисні та антикорозійні полімерні покриття [3].

У зв'язку зі зростанням обсягу застосування полімерних матеріалів, актуальною є задача поліпшення їх фізико-механічних властивостей з метою оптимізації експлуатаційних характеристик. Одним із ефективних шляхів вирішення цієї задачі, який інтенсивно розвивається в останні десятиліття, є отримання полімерних композитів із застосуванням золь-гель технології [4]. У цьому випадку з'являється можливість комбінувати фрагменти органічних і неорганічних складових на молекулярному рівні, здійснюючи направлений синтез органо-неорганічних наповнених полімерів, що мають властивості як полімеру, так і кераміки. Важлива особливість цього способу полягає в тому, що прекурсор або готовий наповнювач може бути введений в систему на різних етапах формування полімерної композиції. Також можна змінювати режими синтезу наповнювача, варіюючи цим розміри його частинок і, відповідно, властивості композиту. У даній роботі для формування полімерної матриці використано епоксиретанові олігомери, що характеризуються комплексом унікальних властивостей в результаті поєднання в їхній молекулярній структурі гнучких уретанових блоків і активних функціональних епоксидних груп. Передбачається, що введення в таку систему наповнювача дає змогу підвищувати рівень цінних для практичного застосування фізико-механічних властивостей.

Відомо, що однією з основних фізико-механічних властивостей матеріалу є мікротвердість. Разом з тим відомо, що мікротвердість є мікромеханічною характеристикою, чутливою до морфологічних і структурних змін у полімерних матеріалах [5]. Для полімерних композитів додатковим діючим фактором впливу на мікромеханічні характеристики є наявність наповнювача, мікротвердість якого набагато перевищує відповідний параметр полімерної матриці [6].

Дослідження мікромеханічних характеристик, які використовуються для контролю технологічних процесів синтезу полімерних матеріалів і визначення їхніх оптимальних експлуатаційних характеристик, має певні досягнення. Проте в цьому науковому напрямку є деякі прогалини і невирішені завдання. Зокрема, мало вивченими є структурні характеристики і зумовлені ними особливості прояву мікромеханічних властивостей епоксиретанових полімерів при введенні до їх складу полісилоксанових частинок (ПСЧ). Враховуючи викладені аспекти, мета цієї

роботи полягала в дослідженні взаємозв'язку між структурою і мікротвердістю полісилоксан-вмісних епоксиретанів при зміні концентрації ПСЧ в полімерній матриці і при застосуванні різних способів їх введення в процесі синтезу золь-гель методом.

Методика експерименту

Епоксиретанова композиція (ЕУ) отримана взаємодією епоксиретанового олігомеру (ЕУО) на основі толуїлендіізоціанату (2,4-2,6 ТДІ) і поліоксипропіленгліколю (ПОПГ) ММ 1052 з подальшим додаванням епоксидного олігомеру ЕД-20, затвердненого ізометилтетрагідрофталевим ангідридом (ІМТГФА) при 125°C.

Синтез неорганічного наповнювача (полісилоксанових частинок) здійснювали золь-гель методом за реакцією гідроліз-конденсація тетраетоксисилану (ТЕОС) [7].

Формування наповнених епоксиретанових олігомерів (нЕУО) здійснювали двома способами: I - синтезуючи полісилоксанові частинки безпосередньо в середовищі ПОПГ при співвідношеннях ТЕОС:H₂O = 1:4 (нЕУО-1 (1:4)) і ТЕОС:H₂O = 1:2 (нЕУО-1 (1:2)); II - вводячи в ПОПГ вже сформований золь ПСЧ при співвідношенні ТЕОС:H₂O = 1:4 і розподіляючи його за допомогою ультразвукового диспергування (нЕУО-2).

Концентрація наповнювача (ПСЧ) в нЕУ-1 (1:2), нЕУ-1 (1:4) і нЕУ-2 при перерахунку на SiO₂ становила 0,001%, 0,5% і 1% мас.

Для аналізу особливостей морфології наповнених епоксиретанів зразки розколювали. Поверхню відколів досліджували методом сканувальної електронної мікроскопії (СЕМ) на мікроскопі JEOL Neo Scope JCM-5000 (Японія) за прискорюючої напруги 10 кВ. Для запобігання накопиченню поверхневого заряду і підвищення контрастності на поверхню відколів в установці Neo Coater (JEOL, Японія) магнетронним методом протягом 3 хвилин було здійснено плазмове напилення шару золота товщиною ~ 10 нм.

Мікротвердість H визначали методом Віккерса за допомогою мікротвердоміра ПМТ-3М. Величину мікротвердості оцінювали, виходячи з формули:

$$H = 1854 \cdot P/d^2 \text{ (кг/мм}^2\text{)},$$

де P - навантаження на індентор; d - діагональ відбитка. Кожна точка на поданих в роботі графіках отримана шляхом вимірювання 20-30 окремих діагоналей відбитків мікроіндентування поверхні, навантаження на індентор

становило $P = 30$ г, час ідентування $t = 10$ с. Про ефект впливу концентрації наповнювача і способу його введення в епоксиретанову матрицю на мікромеханічні властивості можна було судити за величиною відносної зміни мікротвердості наповнених епоксиретанів при зміні концентрації наповнювача. Величину відносної мікротвердості визначали за формулою:

$$\Delta H/H = (H_0 - H_c)/H_0,$$

де $\Delta H = H_0 - H_c$ – різниця значень мікротвердості без наповнювача (H_0) і з наповнювачем (H_c).

Похибка вимірювання відносної мікротвердості складала 3%.

Експериментальні результати та їх обговорення

На рис. 1 наведені результати розрахунків зміни відносної мікротвердості наповнених ЕУ полімерів залежно від концентрації ПСЧ, сформованих в різних умовах.

Аналіз отриманих залежностей свідчить про те, що для всіх варіантів синтезу характерним є збільшення відносної мікротвердості при збільшенні концентрації ПСЧ. При цьому найінтенсивніше зростання відносної мікротвердості спостерігається для зразків, синтезованих II-м способом (нЕУ-2).

Проведені в роботі дослідження структурних змін, пов'язаних зі способами введення ПСЧ в полімерну матрицю і їх концентрацією, виявили взаємозв'язок структурної еволюції зі зміною величини мікротвердості (як структурно-

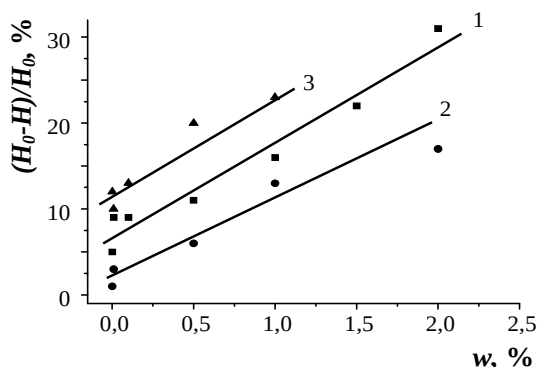


Рис. 1. Ефект зміни мікротвердості наповнених полімерних композицій в залежності від концентрації ПСЧ і способів їх введення в полімерну матрицю: 1 – нЕУ-1 (1:2); 2 – нЕУ-1 (1:4); 3 – нЕУ-2.

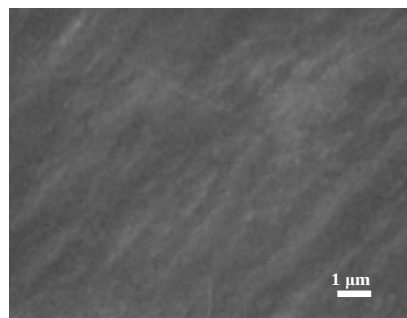


Рис. 2. СЕМ мікрофотографія поверхні відколу епоксиретана без наповнювача.

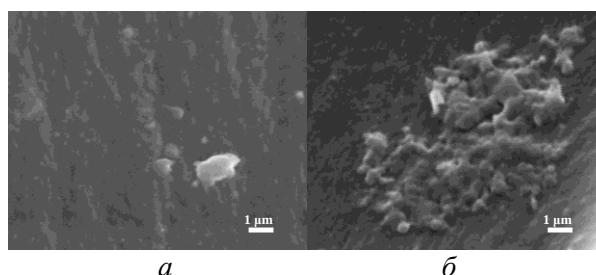


Рис. 3. СЕМ мікрофотографії поверхонь сколу наповненого епоксиретана з концентрацією ПСЧ $w = 0,001\%$:

а) нЕУ-1 (співвідношення ТЕОС:Н₂О = 1:4);
б) нЕУ-2 (співвідношення ТЕОС:Н₂О = 1:4).

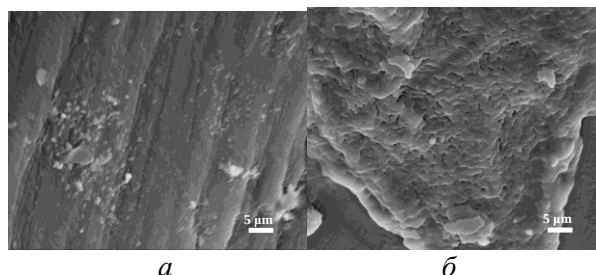


Рис. 4. СЕМ мікрофотографії поверхонь відколу наповненого епоксиретану при співвідношенні ТЕОС:Н₂О = 1:4, вміст ПСЧ 1%:

а) нЕУ-1; б) нЕУ-2.

чутливої характеристики).

Так, якщо вихідний епоксиретан має гомогенну структуру на всій площині зразка (рис. 2), то наповнені ЕУ вирізняються наявністю включень різної форми і розмірів (рис. 3, рис. 4).

Дослідження показали, що проведення гідролітичної поліконденсації при співвідношенні ТЕОС:Н₂О = 1:2 сприяє поглибленню гідролізу і конденсаційних процесів і призводить до утворення полісилоксанових частинок з компактнішою структурою. Відповідно, за однакових

концентрацій ПСЧ значення мікротвердості для нЕУ-1 (1:4) вище, ніж для нЕУ-1 (1:2).

Додаткові дослідження, проведені за допомогою ІЧ-спектроскопії, показали, що при І-му способі (in situ) в ПОПГ формуються ПСЧ, пов'язані з ПОПГ як водневими, так і ковалентними зв'язками, а при ІІ-му способі сформовані ПСЧ мають з ПОПГ лише водневі зв'язки. Характер взаємодії ПСЧ з полімерною матрицею, обумовлений способом введення в ПОПГ, впливає на ступінь їх агрегації. При формуванні нЕУ-1 деякі сегменти ПОПГ були хімічно зв'язані з ПСЧ, що якоюсь мірою запобігало агрегації частинок (рис. 3 а, рис. 4 а). Для таких же концентрацій ПСЧ в нЕУ-2 спостерігається їх значна агрегація внаслідок тільки фізичного зв'язку ПСЧ з ПОПГ (рис. 3 б, рис. 4 б). При цьому порівняння рис. 3 б і рис. 4 б свідчить про те, що зі збільшенням концентрації ПСЧ ступінь їх агрегації зростає. Наші дослідження показали, що агрегації ПСЧ не

спостерігалось для нЕУ-1 при вмісті ПСЧ $\leq 0,001\%$ мас.

Як випливає з порівняння рис. 3 а і рис. 4 а, зі збільшенням концентрації ПСЧ щільність включень, розподілених по всій матриці, збільшується. Такі результати добре узгоджуються зі зростанням мікротвердості при збільшенні концентрації ПСЧ.

Висновки

В роботі встановлено, що мікротвердість епоксиретанових композитів залежить від розмірів і щільності локалізації наповнювача ПСЧ в полімерній матриці. Виявлено, що для обох варіантів синтезу характерним є зростання відносної мікротвердості при збільшенні концентрації ПСЧ. При цьому в полімерних композиціях нЕУ-2 спостерігається більш істотне зростання відносної мікротвердості в порівнянні з полімерними композиціями нЕУ-1.

Список використаних джерел

1. Пасынков В.В. Материалы электронной техники / В.В. Пасынков, В.С. Сорокин. – СПб.: Лань, 2003. – 368 с.
2. Тригуб В.И. Изменение молекулярной структуры резиста на основе метилметакрилата и метакриловой кислоты при модификации ультразвуком / В.И. Тригуб, А.В. Плотнов // Письма в ЖТФ. – 2002. – т.28, вып.8. – С.8-10.
3. Hung K.-Y. Preparation and anticorrosive properties of hybrid coating based on epoxy-silica hybrid materials / K.-Y. Hung, G.-I. Weng, S.-Y. Lin, Y.-H. Yu, et al. / J. of Applied Polymer Science. – 2009. – V.112. – P. 1933-1942.
4. Gao X. Synthesis and characterization of polyurethane/SiO₂ nanocomposites / Gao X., Zhu Y., Zhao X. et al. / Applied Surface Science. – 2011. – V.257, N 10. – P. 4719-4724.
5. Козлов Г.В. Микротвердость полимерных гибридных нанокомпозитов / Г.В. Козлов, Г.Е. Заиков, А.И. Буря, З.Х. Афашагова // Материаловедение. – 2009. – № 12. – С. 26-29.
6. Козлов Г.В. Структура и свойства дисперсно-наполненных полимерных нанокомпозитов / Г.В. Козлов // Успехи физических наук. – 2015. – т.185, № 1. – С. 35-64.
7. Терещенко В.Н. Синтез, структура и свойства полисилоксансодержащих эпоксиретановых нанокомпозитов / В.Н. Терещенко: автореф. дис. ... канд. хим. наук: 02.00.06. (К., 2013).

References

1. PASYINKOV, V. and SOROKIN, V. (2003) *Materials of electronic technics*. SPb.: Lan'.
2. TRIGUB, V. and PLOTNOV, A. (2002) The molecular structure changes of resist based on methylmethacrylate and metakryl acid at ultrasound modification. *Technical Physics Letters*. 28(8). p.8-10.
3. HUNG, K., WENG, G., LIN, S. and YU, Y. (2009) Preparation and anticorrosive properties of hybrid coating based on epoxy-silica hybrid materials *J. of Applied Polymer Science*. 112. p. 1933-1942.
4. GAO, X., ZHU, Y. and ZHAO X. (2011) Synthesis and characterization of polyurethane/SiO₂ nanocomposites. *Applied Surface Science*. 257(10). p. 4719-4724.
5. KOZLOV, G., ZAIKOV, G., BURYA, A. and AFASHAGOVA, Z. (2009) The microhardness of polymer gibrid nanocomposite. *Materialovedenie*. 12. p. 26-29.
6. KOZLOV, G. (2015) The structure and properties of disperse-filled polymer composite *Physics-Uspexhi*. 185(1). p. 35-64.
7. TERESHCHENKO V.N. Synthesis, structure and properties of epoxyurethane-silica nanocomposites: avtoref. dis. ... cand. chem. science: 02.00.06. (K., 2013).

Надійшла до редколегії 25.06.15

УДК 539.26

Теселько П.О.¹, к.ф.-м.н.

**Рентгенодифракційні дослідження
кінетики дефектоутворення в
опромінених нейтронами кристалах Cz-Si**

¹Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: peter@univ.kiev.ua

P. O. Teselko¹, PhD,

**X-ray diffraction investigation of defects
formation kinetics in the neutron-irradiated
Cz-Si crystals**

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: peter@univ.kiev.ua,

Методами трикристальної дифрактометрії виконано порівняльне дослідження розсіяння рентгенівських променів нейтронно-опроміненими і еталонними, вирощеними методом Чохральського, кристалами кремнію. Зразки відпалювались при температурі 900°C протягом різного часу від 6 до 50 годин. Використовуючи динамічну теорію розсіяння, розраховані відповідні значення розмірів і концентрацій киснемістких преципітатів і дислокаційних петель, що утворюються при розпаді твердого розчину кисню і кластеризації радіаційних дефектів. На основі обчислених змін розмірів преципітатів з часом відпалу робиться висновок про збільшення коефіцієнта дифузії атомів кисню в нейтронноопромінених зразках приблизно на порядок.

Ключові слова: дифрактометрія, нейтронноопромінений зразок, кластеризація, дифузія.

By triple-crystal X-ray diffraction methods it was made a comparative study of the formation and growth of defects (precipitates and dislocation loops) under decomposition of supersaturated solid solution of oxygen in the template and neutron-irradiated Czochralski-grown silicon. The samples were annealed at 900 degree C different times during: from 6 to 50 hours. According to the dynamical scattering theory it was calculated values of sizes and concentrations oxygenated precipitates and dislocation loops which formed by the decay of oxygen solid solution and by the clustering of radiation defects. Established that growth of oxygenated precipitates is due to diffusion processes and by their rules. Increase of clusters size lead to sharply decrease their concentration. This is characteristic of for the processes associated with the formation of precipitates. It was found that with increasing annealing time concentration curves shift in the distribution of clusters larger area. The most probable dislocation loops size are few dependent on the annealing time, and their concentration while sharply increasing. Last perhaps due to the influence of dislocations extrusion process stresses in the vicinity to the clusters. The conclusion about the increase of the diffusion coefficient of oxygen atoms in neutron-irradiated samples of approximately on order was made.

Key Words: triple-crystal diffraction, semiconductor, Cz-Si, dislocation, precipitate

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Відомо, що у вирощених методом Чохральського (Cz-Si) монокристалах кремнію може міститись при високих температурах у вигляді твердого розчину до $2 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ атомів кисню. При відпалі таких кристалів в інтервалі температур 600÷1200°C відбувається поступовий розпад твердого розчину з утворенням структурних недосконалостей, в основному кисневомістких преципітатів і дислокаційних петель.

Структура і форма дефектів, що утворюються, залежать від умов відпалу і його

температури. Зокрема, виходячи з електронномікроскопічних даних [1] найбільш простий спектр дефектів утворюється при первинному відпалі кристалів кремнію при 900°C. У цьому випадку утворюються переважно плоскі кисневомісткі преципітати і дислокаційні петлі. Навіть при використанні порівняно невеликих часів відпалу їх можна легко виявити рентгенодифракційними методами [2]. Попереднє нейтронне опромінення кристалів збільшує розміри дефектів, що утворюються [3], тобто вірогідно прискорює розпад твердого

розчину. Останнє, ймовірно, пов'язано зі зміною дифузійних параметрів у спотворених нейтронним опроміненням кристалах. Підтвердити цю гіпотезу можна шляхом дослідження кінетики дефектоутворення. Цьому питанню і присвячена дана робота. При цьому, враховуючи складність процесів, які відбуваються при опроміненні кремнію, їх залежність як від умов експерименту, так і від присутності у зразках домішок, у тому числі і кисню [4], не будемо заглиблювались у їх детальний розгляд.

Вимірювання проводились на кристалах кремнію типу КЕФ-4,5 з робочою поверхнею (111) вирощених методом Чохральського з концентрацією розчиненого кисню приблизно $1 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Вирізані і відполіровані в заводських умовах пластини товщиною 0,7 мм опромінювались в реакторі швидкими нейтронами дозами $1,23 \times 10^{16}$ (зразок №1) і $1,76 \times 10^{16} \text{ н/см}^2$ (зразок №2). На зразках з меншою дозою опромінення вплив останнього помітно відчувався лише при великих часах відпаду.

Опромінені пластини кремнію розрізались на зразки площею $5 \times 10 \text{ мм}^2$ і відпалювались на повітрі при температурі 900°C протягом часу від 6 до 50 годин. Після охолодження зразки хімічно полірувались зі зняттям утвореного окислу. Напівавтоматичний трикристальний (n, -n, n) дифрактометр з однократними симетричними відбиваннями Si(111) дозволяв в режимі θ - 2θ записувати дифрактограми і обчислювати площі піків на них. Останні відповідали їх інтегральній інтенсивності. Фіксувались інтегральні інтенсивності головного і дифузного піків розсіяння. Використовувалось $\text{Cu}_{K\alpha 1}$ випромінювання рентгенівської трубки при падаючій на зразок інтенсивності близько $5 \times 10^5 \text{ імп/с}$.

Виходячи з динамічної теорії розсіяння рентгенівських променів при невеликих розмірах центрів розсіяння інтегральна інтенсивність дифузного $R_\Sigma(\alpha)$ і головного $R_M(\alpha)$ піків дифрактограм визначаються виразами [5]:

$$R_\Sigma(\alpha) = \frac{I_{D\Sigma}}{I_0} = \frac{c C^2 E^2 m_0 j(k_0)}{2\mu_0}, \quad (1)$$

та для головного піка:

$$R_M = \frac{I_M}{I_0} = \frac{C^2 |\chi_{Hr}|^2 E^2}{4 \sin^2 2\theta_B \alpha^2}, \quad (2)$$

де C - поляризаційний фактор, $E = \exp(-L)$ - статичний фактор Дебая-Валлера, $|\chi_{Hr}|$ - модуль Фур'є-компоненти поляризованості кристала, μ_0

- коефіцієнт поглинання, θ_B - кут Брегга, $j(k_0) = B(AR_0^2 \alpha^2 - \ln R_0 \alpha - b)$, а s - концентрація центрів розсіяння. Для кремнію при симетричному бреггівському відбитті рентгенівських променів від площини (111) і вимірювані α і R відповідно в радіанах і сантиметрах, константи, що входять у формули, мають наступні значення: $m_0 = 0,161 \text{ см}^{-1}$. При розсіянні променів на дислокаційних петлях $B = B_K = 4,1036 \times 10^{30} R_D^4$; $A = 4,252 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$, $b = 16,835$. При розсіянні променів на преципітатах $B = B_P$; $A = 2,081 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$, $b = 17,183$. У випадку якщо преципітати переважно плоскі відповідні оцінки дають $B_P = 7,19 \times 10^{34} R_P^{4,8}$. При сферичних преципітатах $B_P = 7,50 \times 10^{43} R_P^6$.

Виходячи з (1) і (2):

$$Q = \frac{R_\Sigma(\alpha)}{R_M} = \frac{2cm_0 \sin^2 2\theta_B j(k_0) \alpha^2}{\mu_0 |\chi_{Hr}|^2} \quad (3)$$

Важливо, що останнє співвідношення не залежить від I_0 і може бути визначено за однією і тією ж дифрактограмою. Відповідно воно не повинно залежати від змін I_0 і геометричних неточностей установки зразка на гоніометрі. Залежність від α величини Q/α^2 визначається виразом $j(k_0)$. І при реально невеликих розмірах центрів розсіяння повинна лінійно змінюватись зі зміною $\ln \alpha$. При одному типі дефектів екстраполяція отриманої прямої на значення $Q=0$ дає можливість отримати радіуси центрів розсіяння R , а кут нахилу прямої їх концентрацію s .

У нашому випадку при наявності двох типів центрів розсіяння і різних величинах не тільки їх характеристик, але і константи b в $j(k_0)$ можна було очікувати наявності на залежності Q/α^2 від $\ln \alpha$ двох ділянок прямої з різними нахилами. У цьому випадку виникала можливість роздільного обчислення середніх розмірів і концентрацій як дислокаційних петель, так і преципітатів. Зазначимо, що усереднення тут відбувається по інтервалу характеристик цих дефектів, які визначаються рентгенографічно, тобто приблизно від $R=10^{-6} \text{ см}$ до декількох мікрон. В області $R < 10^{-6} \text{ см}$ виходячи з наведених формул $Q \approx 0$, а при великих R Q стає нульовим за рахунок малої концентрації цих утворень.

Отримані дифрактограми для кожного з кутів повороту зразка α мали звичайний трипіковий вигляд і для опромінених і вихідних зразків відрізнялись суттєво в основному інтенсивністю дифузного максимуму. За цими максимумами обчислювались величини $Q(\alpha)$ для конкретних значень α . Приклади цих даних в координатах

$Q/\alpha^2 - \ln \alpha$ нанесені на графіках рис. 1. Видно, що як і очікувалось, криві діляться на дві майже прямолінійні ділянки. Деяка їх нелінійність ймовірно обумовлена з одного боку перекриттям ділянок, а з іншого існуванням певного розподілу обох типів дефектів по розмірам.

Описаний вище варіант розрахунків давав можливість оцінити середні розміри і концентрації як преципітатів, так і дислокаційних

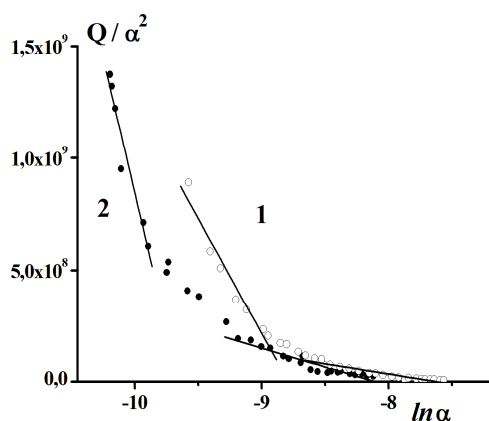


Рис. 1. Залежність величин Q/α^2 від $\ln \alpha$ для зразків відпалених протягом 50 год для вихідного зразка (1) та зразка 2 опроміненого нейтронами (2)

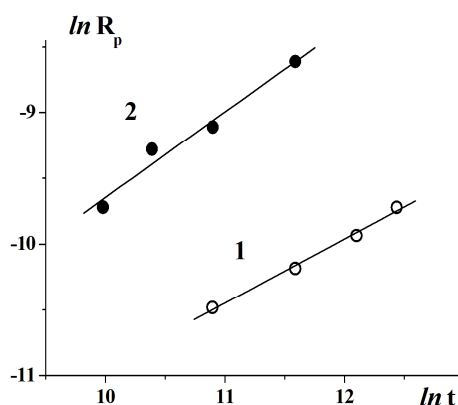


Рис. 2. Залежність логарифма радіуса преципітатів від логарифма часу відпалу (1) зразок № 1, (2) зразок № 2.

петель. Розміри преципітатів і у випадку еталонних і у випадку опромінених зразків зростають з часом відпалу. При чому в опромінених зразках вони дещо більші. Що стосується дислокаційних петель, то зростання їх розмірів з часом відбувається менш інтенсивно. Останнє, як нам здається, обумовлене паралельним протіканням двох процесів –

коагуляції занурених атомів кремнію і видавлювання напруженнями, що створюються у околі киснемістких преципітатів. Зрозуміло, що у випадку преципітатів процес зростання їх розмірів повинен контролюватися дифузією атомів кисню до киснемісткого центру. Тоді за час t при коефіцієнті дифузії D в центрі зберуться атоми кисню з об'єму $V = \frac{4}{3}\pi r^2$, де $r = \sqrt{2Dt}$.

Якщо в одиниці об'єму кремнію міститься Δn_0 надлишкових по відношенню до границі розчинності при даній температурі атомів кисню, то в преципітат потраплять $V\Delta n_0$ атомів, у результаті чого його об'єм стане рівним $V_p = V\Delta n_0 V_0$, де V_0 – об'єм, який займає одна киснемістка молекула. Якщо рахувати, що в нашому випадку утворюються в основному плоскі преципітати, то $V_p = \pi R_p^2 h_p$, де $h_p \approx 6,08 \times 10^{-5} R_p^{0.4}$ [3, 7]. Відповідно

$$R_p^{2.4} = 6,19 \times 10^4 n_0 V_0 (Dt)^{3/2} \quad (4)$$

Звідси, при фіксованому часі відношення коефіцієнтів дифузії в опромінених і відпалених зразках складає

$$D_n/D_e = \left(\frac{R_n}{R_e} \right)^{1.6} \quad (5)$$

На рис. 2 представлена експериментальна залежність $\ln R_p$ від $\ln t$. Якщо прийняти, що $\Delta n_0 \approx 5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при 900°C [7], а об'єм, що відноситься до одного кисневого атому в структурі коезита вважати рівним приблизно $50 \text{ \AA}^3$, то для D отримаємо $5,6 \times 10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$ (зразок №1), $4,17 \times 10^{-11} \text{ см}^2/\text{с}$ (зразок №2). У порівнянні з еталонним зразком, коефіцієнт дифузії якого становив $2 \times 10^{-12} \text{ см}^2/\text{с}$, бачимо, що більші дози опромінення ведуть до збільшення коефіцієнта дифузії.

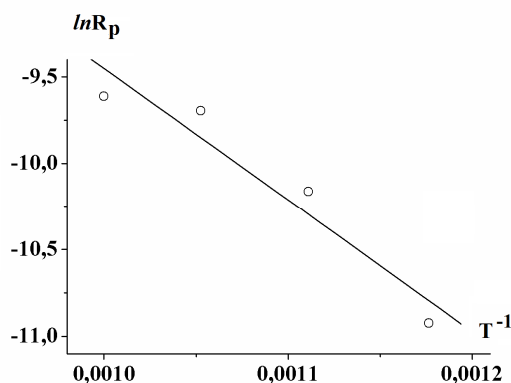


Рис. 3. Залежність $\ln R_p$ від $1/T$

Була реалізована можливість оцінити енергію активації дифузії кисню в кремнії. Якщо

$D = D_0 \exp(-Q/kT)$ то залежність $\ln R_p$ від $1/T$ повинна бути лінійною, а її нахил визначає Q . За наведеними на рис. 3 даними $Q = 2,17 \text{ eV}$ проти літературного значення цієї величини $2,44 \text{ eV}$.

Утворення кисневих преципітатів приводить до пружних напружень в матриці кремнію внаслідок відмінності молекулярних об'ємів окисла і матриці. Тому можна було очікувати змін з часом відпалу статичного фактора Дебая-Валлера, що характеризує середньоквадратичне зміщення атомів з своїх рівноважних положень. При $\alpha = \text{const}$ $\Delta \ln R_M = 2\Delta L$, виходячи з експериментальних даних можна обчислити ΔL [6]. Виявилось, що зростання цієї величин з

часом відпалу складає максимум 0,14 для зразка №1 і 0,5 для зразка №2.

Отже, в роботі виконано дослідження процесу утворення і росту дефектів при ізотермічному розпаді пересиченого твердого розчину кисню в еталонному та опромінену нейтронами кремнії. Ріст киснемістких преципітатів відбувається за рахунок дифузійних процесів і за їх законами. Зростання розмірів кластерів різко зменшує їх концентрацію. Найбільш ймовірні розміри дислокаційних петель мало залежать від часу відпалу, а їх концентрації при цьому різко зростають. Останнє, найімовірніше, зумовлено дією процесів видавлювання дислокацій присутніми в околі кластерів напругами.

Список використаних джерел

1. *Bender H.* Investigation of the Oxygen Related Lattice Defects in Czochralski Silicon by Means of Electron Microscopy Techniques / H. Bender // *Phys. Stat. Sol. (a)*. – 1984. – Vol. 86, № 1. – P. 245-261.
2. *Новиков Н.Н.* Рентгеновские исследования параметров примесно-структурных комплексов в прошедших термообработку кристаллах кремния / Н.Н. Новиков, Б.Д. Пацай // *Металлофиз. новейшие технол.* – 2003. – том 25, №2. – С. 257-268.
3. *Макара В.А.* Рентгенодифракционное исследование влияния нейтронного облучения на процессы дефектообразования в отожженных при высоких температурах кристаллах Cz-Si / Макара В.А., Н.Н.Новиков, В.Д. Пацай. // *Физика твердого тела*. – 2005. – том 47, вып. 10. – С. 1791-1795.
4. *Вавилов В.С.* Действие излучения на полупроводники. / Вавилов В.С., Кекелидзе Н.П., Смирнов Л.С.. – Москва: Наука, 1988. – 192 с.
5. *Olikhovskii S.I.* Bragg Diffraction of X-Rays by Single Crystals with Large Microdefects/ S.I. Olikhovskii, V.B. Molodkin, E.N. Kislovskii, E.G. Len, E.V. Pervak // *Phys. St. Sol. (b)*. – 2002. – V. 231. № 1. – P. 213-221.
6. *Новиков Н.Н.* Простой способ определения основных параметров примесно-структурных несовершенств методом интегродифференциальной трехкристальной рентгеновской дифрактометрии / Н.Н. Новиков, С.И. Олиховський, В.Г. Сушко, П.А. Теселько // *Металлофизика и новейшие технологии*. – 2001. – Т. 23, № 3. – С. 283-292.
7. *Бабич В.М.* Кислород в монокристаллах кремния/ Бабич В.М., Блецкан Н.И., Венгер Е.Ф. – Киев: “Интерпресс ЛТД”, 1997. – 239 с.

References

1. BENDER, H. (1984) Investigation of the Oxygen Related Lattice Defects in Czochralski Silicon by Means of Electron Microscopy Techniques. *Phys. St. Sol. (a)*. 86(1). p.245-261.
2. NOVIKOV, N.N. & PATSAJ, B.D. (2003) X-ray investigation of doped-structural komplex parameters in silicon crystals after thermal treatment. *Metallofiz. Nov. Tehnol.* 25(2). p.257-268.
3. MAKARA, V.A., NOVIKOV, N.N. & PATSAJ, B.D. (2005) X-ray diffraction investigation of effect of neutron irradiation on processes of defect formation in annealed at high temperatures crystals Cz-Si *Fizika Tverdogo Tela*. 47(10). p.1791-1795.
4. VAVILOV, V.S., KEKELIDZE, N.P. and SMIRNOV, L.S. (1988) *The action of radiation on semiconductors*. Moskva: Nauka.
5. OLIKHOVSKII, S.I., MOLODKIN, V.B., KISLOVSKII, E.N., LEN, E.G. & PERVAK, E.V. (2002) Bragg Diffraction of X-Rays by Single Crystals with Large Microdefects. *Phys. St. Sol. (b)*. 231(1). p.213-221.
6. NOVIKOV, N.N., OLIKHOVSKII, S.I., SUSHKO, V.G. & TESELKO, P.O. (2001) A simple method of determination of basic parameters of doped-structural imperfections by integro-differential triple-crystal X-ray diffractometry. *Metallofiz. Nov. Tehnol.* 23(3). p.283-292.
7. BABICH, V.M., BLECKAN, N.I. and VENGER, E.F. (1997) *Oxygen in silicon monocrystals*. Kiev: Interpress LTD.

Надійшла до редколегії 23.09.15

Підписано до друку _____. Формат _____. Друк. офс.
Папір офс. № _____. Друк. арк. _____. Тираж _____. Зам. _____.
Друкарня _____.