

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

В І С Н И К

**КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО
УНІВЕРСИТЕТУ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

СЕРІЯ ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК №1 2017

**Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка,
выпуск №1, 2017,**

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 комп'ютерних наук та кібернетики.

Журнал “Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки” включено до переліку фахових видань ВАК України, в яких можуть публікуватися результати дисертаційних робіт на здобуття наукових ступенів доктора і кандидата наук (затверджено наказом Міністерства освіти і науки України №1222 від 07.10.2016), та реферується в Реферативному журналі, Zentralblatt MATH 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., проф.;
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, rodtnv@univ.kiev.ua;
Хмелюк Надія Кузьмівна, khmeluk@univ.kiev.ua;
Сільвейструк Людмила Миколаївна, **технічний редактор**, slm-klm@ukr.net.

Адреса редакційної колегії:

Факультет комп'ютерних наук та 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

Островська О.В., Проскурін Д.П., Якимів Р.Я. Про клас інтегровних зображень віківського аналогу CCR	9
---	---

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Клімчук Т.В., Острик В.І. Фрикційний контакт двох півнескінчених штампів і пружної смуги	15
Рожок Л.С. Рівновага порожнистих некругових циліндрів при зміні форми їх поперечного перерізу	21

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Алієв Н., Ібрагімов Н., Ніфтуллаєва Ш. Дослідження крайової задачі для рівняння складеного типу з граничною умовою, що включає нелокальні та глобальні вирази	27
Бармак О.В., Крак Ю.В., Багрій Р.О. Моделювання системи прогнозування тексту	35
Івохін Є.В., Науменко Ю.О. Про окремі математичні моделі процесу розповсюдження реклами в соціумі	39
Кузьмич О.І., Мекуш О.Г., Протасюк Н.А. Аналіз стійкості руху мобільних роботів. Застосування до задачі аналізу руху літака по злітній смузі	43
Путренко В.В., Пашинська Н.М. Інтелектуальний аналіз геопросторових даних як інструмент планування сталого розвитку	49
Рудницький А.В., Кобзар А.Ю. Програмно-апаратний комплекс для автоматичної побудови панорамних знімків	56
Ставровський А. Б., Ніщик О. В. Навчальна система для відображення та обчислення опору ділянки електричного кола	61
Стоян В.А., Даниш С.Т. Про математичне моделювання розв'язку тривимірної задачі динамічної теорії пружності	65
Терещенко В.М., Танчук В.В., Терещенко Я.В. Розпізнавання та побудова контуру об'єкта на зображенні за допомогою діаграми Вороного	69
Федорус О.М. Застосування ПАРКС-С# для моделювання паралельно-рекурсивних процесів	75
Шевчук Ю.М. Моделі розповсюдження інформації з малим параметром	80

РАДІОФІЗИКА

Натаров Р. М., Судаков О. О., Радченко С. П. Компенсація просторової неоднорідності розподілу магнітного поля у магніторезонансній системі	91
--	----

СУЧАСНА ФІЗИКА

Бардик В.Ю., Тимофєєв М.В. Контракція водних розчинів метанолу	97
Горкавенко Т.В., Плющай І.В., Плющай О.І., Макара В.А. Ab initio розрахунок взаємодії домішки азоту з крайовою дислокацією в кремнії	103
Гриценко К.П., Ящук В.М., Навозенко О.М., З. Шрадер Застосування нанесених у вакуумі перфторполімерних плівок в органічних світлодіодах, органічних польових транзисторах і фотовольтаїчних пристроях	105
Курилюк В.В., Кріт О.М., Суховерська Н.М. Вплив деформації на теплопровідність SiGe гетероструктур з квантовими точками	115
Мельниченко Л. Ю., Поперенко Л. В., Юргелевич І. В. Оптична анізотропія наноструктурованого кремнію	119
Мотолига О.В., Сенчуров С.П. Впровадження режиму цифрового томосинтезу з використанням обладнання цифрової рентгенографії	123
Нагорна Т.В., Свечнікова О.С., Худоба Д. Дослідження непружного розсіяння нейтронів за допомогою спектрометра НЕРА	127
Ніколаєнко А.В., Гололобов Ю.П., Боровий М.О. Рентгенівська дилатометрія C та $2C$ політипів сегнетоелектрика $TlInS_2$ в діапазоні температур 180 К - 300 К	133
Поперенко Л.В., Пророк В.В., Розуван С.Г., Шайкевич І.А. Скануюча тунельна мікроскопія вітаміну B_{12}	137
Сіжук А.С. Спостереження когерентного перевипромінювання пару HF у багатопрхідній комірці Уайта	141

CONTENTS

ALGEBRA, GEOMETRY AND PROBABILITY THEORY

Ostrovska O.V., Proskurin D.P., Yakymiv R.Ya. On a class of integrable representations of Wick analog of CCR	9
--	---

DIFFERENTIAL EQUATIONS, MATHEMATICAL PHYSICS AND MECHANICS

Klimchuk T.V., Ostryk V.I. Frictional contact problem for two semi-infinite punches and an elastic strip	15
Rozhok L.S. Equilibrium non-circular hollow cylinders by changing the shape of the cross section	21

COMPUTER SCIENCES AND INFORMATICS

Aliyev N., Ibrahimov N., Niftullayeva Sh. Investigation of the boundary problem for the composite type equation with boundary condition involving non-local and global terms	27
Barmak O.V., Krak Iu.V., Bagriy R.O. Modeling the text prediction system	35
Ivohin E.V., Naumenko Yu.O. About some mathematical models of the advertising distribution in socium	39
Kuzmych O.I., Mekush O.G., Protasiuk N.A. Analysis of mobile robot motion stability. Application to the problem of analyzing the motion of aircraft on runway	43
Putrenko V.V., Pashynska N.M. Data mining of geospatial data as a tool for sustainable development planning	49
Rudnitskiy A., Kobzar A. Programmatic-hardware complex for automatic panoramic images building	56
Stavrovskiy A.B., Nishchuk O.V. Educational system for displaying and calculating the resistance of the electric circuit	61
Stoyan V.A., Danysh S.T. About mathematical modeling of three-dimensional problem solving dynamic elasticity	65
Tereshchenko V.M., Tanchuk V.V., Tereshchenko Y.V. The properties of the network model with different types of nodes in the stationary regime	69
Fedorus O.M. Applying PARCS-C# for modeling parallel-recursive processes	75
Shevchuk I.M. Mathematical models of information spreading process with small parameters	80

RADIOPHYSICS

Natarov R.M., Sudakov O.O., Radchenko S.P. Compensation of magnetic field spatial heterogeneity in magnetic resonance imaging system	91
--	----

MODERN PHYSICS

Bardic V.Yu., Timofeev M.V. Contraction of water-methanol solutions	97
Gorkavenko T.V., Plyushchay I.V., Plyushchay O.I., Makara V.A. Ab initio calculation of interaction between nitrogen impurity and edge dislocation in silicon	103
Grytsenko K.P., Yashchuk V.M., Navozenko O.M., Schrader S. Applications of vacuum-deposited perfluoropolymer films in organic light-emitting diodes, organic field-effect transistors and photovoltaic devices	105
Kuryliuk V.V., Krit O.M., Sukhovska N.M. Strain effects on thermal conductivity of SiGe heterostructures with quantum dots	115
Melnychenko L.Yu., Poperenko L.V., Yurglevych I.V. Optical anisotropy of nanostructured silicon	119
Motolyha O.V., Senchurov S.P. The implementation of the digital tomosynthesis mode into the radiological table modality	123
Nagorna T.V., Svechnikova O.S., Chudoba D. Inelastic neutron scattering studying by NERA spectrometer	127
Nikolaienko A.V., Gololobov Yu.P., Borovoy M.O. The X-Ray dilatometry of C та $2C$ polytypes of $TlInS_2$ ferroelectrics in temperature range 180 K - 300 K	133
Poperenko L.V., Prorok V.V., Rozouvan S.G., Shaykevich I.A. Scanning tunneling microscopy of vitamin B_{12}	137
Sizhuk A.S. The observation of the coherent reemission by HF vapor in the multiple-path White cell	141

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРИЯ ТА ТЕОРИЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

УДК 517.98

О.В. Островська¹, к.ф.-м.н., доцент
Д.П. Проскурін², д.ф.-м.н., доцент
Р.Я. Якимів² к.ф.-м.н., доцент

Про клас інтегровних зображень віківського аналогу ССР

¹ Національний технічний університет
України "КПІ" 03056, г.Київ-56, проспект Пе-
ремоги, 37

²Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Воло-
димирська, 64.

e-mail: ²prosk@univ.kiev.ua

O.V. Ostrovska¹, Ph.D., Associate Professor
D.P. Proskurin², Doctor of Sci., Associate
Professor

R.Ya. Yakymiv², Ph.D., Associate Professor

On a class of integrable representations of Wick analog of CCR

¹National Technical University of Ukraine
"KPI", 03056, Kyiv, 37 Prospect Peremogy,

²Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01033, Kyiv, 64 Volodymyrska st.,

e-mail: ²prosk@univ.kiev.ua

У роботі вивчаються питання про означення інтегровного зображення віківської версії канонічних комутаційних співвідношень з двома степенями свободи. А саме, розглянуто зображення, які анулюють максимальний кубічний ідеал. Наведено зв'язок розглянутої алгебри з нілпотентними алгебрами Лі. Завдякому цьому є можливість визначити інтегровне зображення в термінах інваріантної області роздільно аналітичних векторів для образів твірних алгебри.

Ключові слова: віківська алгебра, канонічні комутаційні співвідношення, однорідний ідеал, інтегровне зображення, аналітичні вектори, алгебра Лі.

In the paper we study integrable representations of Wick version of canonical commutation relations with two degrees of freedom in terms of creation and annihilation operators. Namely we consider the quotient of this algebra by the largest cubic ideal. We recall the notion of analytic vector for the family of closed operators acting on Hilbert space, and introduce the notion of strong analytic vector for the family of closed operators. We present two versions of integrable representation. First in terms of dense invariant domain consisting of strong analytic vectors for generators of algebra. The second one is given in terms of dense invariant domain of analytic vectors for Laplace operator. It is shown that algebra under consideration is isomorphic to nilpotent Lie algebra. Using this fact we prove that two versions of definition of integrable representation are equivalent. Moreover, we prove that conditions of second definition is equivalent to the existing of dense invariant domain consisting of separately analytic vectors of squares of positive components from the polar decompositions of generators.

Key Words: Wick algebra, canonical commutation relations, homogeneous ideal, integrable representation, analytic vectors, Lie algebra.

Communicated by Prof. Kirichenko V.V.

1 Вступ

В цій роботі ми продовжуємо вивчати питання, пов'язані з інтегровністю зображень віківського аналогу алгебри канонічних комутаційних співвідношень з двома степенями свободи.

А саме, розглянемо $*$ -алгебру $\mathcal{WA}$, породжену твірними $a_i, a_i^*, i = 1, 2$, що задовольняють співвідношення наступного вигляду:

$$a_i^* a_i - a_i a_i^* = 1, \quad i = 1, 2, \quad a_1^* a_2 = a_2 a_1^*.$$

Цю $*$ -алгебру будемо називати віківським аналогом ССР з двома степенями свободи, що-

до теорії $*$ -алгебр з віківським впорядкуванням див. [4].

Основну увагу останніми роками було присвячено вивченню зображень алгебри $\mathcal{WA}$, що анулюють так звані віківські однорідні ідеали, див. [4].

Означення 1.1. Віківським однорідним ідеалом в $\mathcal{WA}$ називається двосторонній ідеал $\mathcal{I}$ в вільній алгебрі $\mathbb{C}\langle a_1, a_2 \rangle$, породжений однорідними многочленами фіксованого степеню, для якого

$$a_i^* \mathcal{I} \subset \mathcal{I} + \mathcal{I} a_1^* + \mathcal{I} a_2^*, \quad i = 1, 2.$$

Відомо, див. [4], що максимальний квадра-

тичний віківський ідеал $\mathcal{I}_2$ породжується елементом $A = a_2a_1 - a_1a_2$. Таким чином, фактор-алгебра $\mathcal{WA}/\mathcal{I}_2$ співпадає з алгеброю $\mathcal{A}$ канонічних комутаційних співвідношень з двома степенями свободи:

$$\mathcal{A} = \mathbb{C}\langle a_i^*a_i - a_ia_i^* = 1, \\ a_1^*a_2 = a_2a_1^*, a_2a_1 = a_1a_2, i = 1, 2 \rangle.$$

Нижче нам будуть потрібні означення аналітичних векторів для замкнутого оператора та сумісно аналітичних векторів для набору замкнених операторів, див. [1].

Означення 1.2. Нехай A — лінійний оператор, що діє на гільбертовому просторі $\mathcal{H}$. Вектор f називається аналітичним вектором для A , якщо $f \in \mathcal{D}(A^k)$, $k \in \mathbb{N}$, та радіус збіжності ряду

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\|A^n f\|}{n!} S^n$$

ненульовий.

Зауваження 1. Вектор $f \in \mathcal{D}$ є аналітичним для A тоді й лише тоді, коли знайдуться $C > 0$ та $M > 0$ такі, що

$$\|A^n f\| \leq C \cdot M^n n!.$$

Позначимо через Δ_n , $n \in \mathbb{N}$, множину всіх слів довжини n в алфавіті $\mathcal{F} = \{A_j, j = 1, \dots, d\}$. В подальшому з кожним словом $\nu \in \Delta_n$ ми будемо ототожнювати відповідний добуток операторів.

Означення 1.3. Нехай область $\mathcal{D}$ є інваріантною відносно сім'ї замкнених операторів $\mathcal{F} = \{A_j, j = 1, \dots, d\}$. Будемо казати, що вектор $f \in \mathcal{D}$ є сумісно аналітичним відносно сім'ї $\mathcal{F}$, якщо радіус збіжності ряду

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{S^n}{n!} \sum_{\nu \in \Delta_n} \|\nu f\|$$

є ненульовим.

Означення 1.4. Нехай область $\mathcal{D}$ є інваріантною відносно сім'ї замкнених операторів $\mathcal{F} = \{A_j, j = 1, \dots, d\}$. Будемо казати, що вектор $f \in \mathcal{D}$ задовольняє умові посиленої сумісної аналітичності відносно сім'ї $\mathcal{F}$, якщо радіус збіжності ряду

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{S^n}{n!} \sum_{\nu \in \Delta_{2n}} \|\nu f\|$$

є ненульовим.

Зауваження 2. Для того, щоб вектор $f \in \mathcal{D}$ був сумісно аналітичним відносно сім'ї $\mathcal{F}$ необхідно та достатньо, щоб існували $C > 0$, $M > 0$ для яких

$$\sum_{\nu \in \Delta_n} \|\nu f\| \leq C \cdot M^n n!.$$

Відповідно посилена сумісна аналітичність еквівалентна умові

$$\sum_{\nu \in \Delta_{2n}} \|\nu f\| \leq C \cdot M^n n!.$$

Нагадаємо означення інтегровного зображення $\mathcal{A}$.

Означення 1.5. Будемо казати, що замкнені оператори A_i , $i = 1, 2$, визначають інтегровне зображення $*$ -алгебри $\mathcal{A}$, якщо знайдеться щільна область $\mathcal{D}$, інваріантна відносно A_i , A_i^* , $i = 1, 2$, яка складається з аналітичних векторів оператора $\Delta = A_1A_1^* + A_2A_2^*$, та на всіх векторах $\mathcal{D}$ виконуються визначальні співвідношення.

Нагадаємо також, що єдине незвідне інтегровне $*$ -зображення алгебри $\mathcal{A}$ визначене, з точністю до унітарної еквівалентності, наступним чином: простір зображення $\mathcal{H} = l_2(\mathbb{Z}_+) \otimes l_2(\mathbb{Z}_+)$,

$$A_1 = a \otimes \mathbf{1}, \quad A_2 = \mathbf{1} \otimes a, \\ ae_n = \sqrt{n+1}e_{n+1}, \quad n \in \mathbb{Z}_+.$$

2 Зображення $\mathcal{WA}$, що анулюють кубічний однрідний ідеал

В роботі [6] вивчалися зображення $\mathcal{WA}$, що анулюють максимальний кубічний віківський ідеал $\mathcal{I}_3$. Позначимо через $a_{12} = a_2a_1 - a_1a_2$. Твірні максимального кубічного ідеалу мають наступний вигляд:

$$a_{12}a_1 - a_1a_{12}, \quad a_{12}a_2 - a_2a_{12}.$$

Крім того в $\mathcal{WA}$ мають місце співвідношення

$$a_1^*a_{12} = a_{12}a_1^*, \quad a_2^*a_{12} = a_{12}a_2^*.$$

Таким чином елемент a_{12} належить центру $*$ -алгебри $\mathcal{A}_3 = \mathcal{WA}/\mathcal{I}_3$. Легко також перевірити, що цей елемент є нормальним.

В роботі [6] вивчалися незвідні зображення $\mathcal{A}_3$. З леми Шура випливає, що в незвідному зображенні образ елемента $a_{12} = y\mathbf{1}$ для деякого $y \in \mathbb{C}$. Очевидно, що випадок $y = 0$ визначає зображення алгебри $\mathcal{A}$. Для $y \neq 0$ позначимо через $\mathcal{A}_{3,y}$ алгебру, породжену співвідношеннями

$$\begin{aligned} a_i^* a_i - a_i a_i^* &= 1, \quad i = 1, 2, \\ a_1^* a_2 &= a_2 a_1^*, \quad a_2 a_1 - a_1 a_2 = y. \end{aligned}$$

В [6] було показано, що при заміні твірних вигляду $b_1 = a_1$, $b_2 = a_2 - ya_1^*$ отримуємо співвідношення наступного вигляду:

$$\begin{aligned} b_1^* b_1 - b_1 b_1^* &= 1, \quad b_2^* b_2 - b_2 b_2^* = 1 + |y|^2, \\ b_1^* b_2 &= b_2 b_1^*, \quad b_2 b_1 = b_1 b_2. \end{aligned} \quad (1)$$

Також там було запропоновано вважати інтегровним зображенням $\mathcal{A}_{3,y}$ таке, в якому образи твірних b_i , b_i^* , $i = 1, 2$, породжують інтегровне зображення $*$ -алгебри $\mathcal{A}$.

В цій частині ми покажемо, яким чином дати означення інтегровного зображення $\mathcal{A}_{3,y}$ безпосередньо в термінах образів твірних a_i , a_i^* , $i = 1, 2$. Для цього побачимо, що $\mathcal{A}_{3,y}$ для кожного $y \in \mathbb{C} \in$ алгеброю Лі.

Отже, нехай замкнені оператори A_i , A_i^* , $i = 1, 2$, задовольняють на замкненій інваріантній області $\mathcal{D} \subset \mathcal{H}$ співвідношення

$$\begin{aligned} A_i^* A_i - A_i A_i^* &= 1, \quad A_1^* A_2 = A_2 A_1^*, \\ A_2 A_1 - A_1 A_2 &= y\mathbf{1}. \end{aligned} \quad (2)$$

Тоді вони визначають зображення комплексної алгебри Лі $\mathcal{L}$, породженої співвідношеннями наступного вигляду.

$$\begin{aligned} [a_i^*, a_i] &= Z, \quad [a_1^*, a_2] = 0, \quad [a_2^*, a_1] = 0, \\ [a_2, a_1] &= Y, \quad [a_i, Y] = 0, \quad [a_i^*, Y] = 0, \\ [Z, a_i] &= 0, \quad [Z, a_i^*] = 0, \quad [Y, Z] = 0, \\ [Y^*, Y] &= 0, \quad [Y^*, Z] = 0, \quad Z = Z^* \end{aligned} \quad (3)$$

в якому $Z \mapsto \mathbf{1}$ та $Y \mapsto y\mathbf{1}$. Побудуємо оператори

$$P_j = \frac{1}{2}(A_j + A_j^*), \quad Q_j = \frac{1}{2i}(A_j - A_j^*), \quad j = 1, 2.$$

В теорії алгебр Лі інтегровним називають зображення, таке, що відповідне зображення дійсної форми алгебри визначає унітарне зображення відповідної групи Лі. Для цього необхідно

і достатньо, див. [5], щоб для операторів P_i , Q_i , $i = 1, 2$, існувала щільна область сумісно аналітичних векторів. Очевидно, що для цього необхідно і достатньо вимагати сумісну аналітичність $\mathcal{D}$ відносно сім'ї $\{A_j, A_j^*, j = 1, 2\}$. Таким чином має місце наступне твердження.

Твердження 1. *Зображення алгебри $\mathcal{A}_{2,y}$ буде задавати інтегровне зображення алгебри Лі $\mathcal{L}$ тоді й лише тоді, коли існуватиме щільна інваріантна область $\mathcal{D}$, вектори якої є сумісно аналітичними відносно сім'ї $\{A_j, A_j^*, j = 1, 2\}$, та оператори A_j , A_j^* , $j = 1, 2$, задовольняють співвідношення (2) на $\mathcal{D}$.*

Зауваження 3. *Очевидно, що з сумісної аналітичності векторів $\mathcal{D}$ відносно сім'ї $\{A_i, A_i^*, i = 1, 2\}$ буде випливати їх сумісна аналітичність відносно $\{A_1, A_1^*, B_2, B_2^*\}$, де $B_2 = A_2 - yA_1^*$, а отже інтегровність зображення двовимірних CCR, що задається операторами A_1, B_2 . Обернене твердження також вірне. Таким чином інтегровність зображення алгебри $\mathcal{A}_{2,y}$ в сенсі означення з роботи [6] еквівалентна інтегровності зображення алгебри Лі $\mathcal{L}$.*

В роботі [2] доведено, що для інтегровності зображення $\mathcal{L}$ достатньо вимагати роздільну аналітичність векторів $\mathcal{D}$ відносно операторів P_j , Q_j , $j = 1, 2$. В статті [3] доводиться, що інтегровність зображення алгебри Лі впливає з існування щільної інваріантної області векторів, аналітичних для оператора

$$\sqrt{\mathbf{1} + \sum_{j=1,2} (P_j^2 + Q_j^2)} = \sqrt{A_1^* A_1 + A_2^* A_2}.$$

Звідси легко одержати наступний результат:

Твердження 2. *Замкнені оператори A_i , $i = 1, 2$, визначають інтегровне зображення $\mathcal{A}_{2,y}$ тоді й лише тоді, коли знайдеться скрізь щільна область $\mathcal{D}$, інваріантна відносно операторів A_i , A_i^* , $i = 1, 2$, вектори якої є аналітичними для операторів $T_1^2 = A_1^* A_1$ та $T_2^2 = A_2^* A_2$.*

Доведення. Нехай $\Delta = T_1^2 + T_2^2$ та $f \in \mathcal{D}$. З аналітичності f для T_i^2 знайдуться $M_i > 0$, $i = 1, 2$, такі, що

$$\|T_i^{2n} f\| \leq M_i^n n!, \quad i = 1, 2.$$

Тоді

$$\begin{aligned} \|\Delta^{\frac{n}{2}} f\|^2 &= \langle \Delta^n f, f \rangle = \\ &= \sum_{k=0}^n C_n^k \langle T_1^{2(n-k)} T_2^{2k} f, f \rangle \leq \\ &\leq \sum_{k=0}^n C_n^k \langle T_1^{2(n-k)} f, T_2^{2k} f \rangle \leq \\ &\leq \sum_{k=0}^n C_n^k \|T_1^{2(n-k)} f\| \cdot \|T_2^{2k} f\| \leq \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\leq \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k! \cdot (n-k)!} M_1^{n-k} M_2^k (n-k)! \cdot k! \leq \\ &\leq n \cdot \max\{M_1, M_2\}^n n! \leq \\ &\leq 2^n \max\{M_1, M_2\}^n n!. \end{aligned}$$

Отже,

$$\begin{aligned} \|\Delta^{\frac{n}{2}} f\| &\leq 2^{\frac{n}{2}} \max\{M_1, M_2\}^{\frac{n}{2}} \sqrt{n!} \leq \\ &\leq 2^{\frac{n}{2}} \max\{M_1, M_2\}^{\frac{n}{2}} n! \end{aligned}$$

та вектор f є аналітичним для $\sqrt{\Delta}$. $\square$

Список використаних джерел

1. Березанский Ю.М., Ус Г.Ф., Шефтель З.Г. Функциональный анализ. Курс лекций. / Ю. М. Березанский, Г.Ф. Ус, З.Г. Шефтель // Киев: Высшая школа, 1990. –600 С.
2. Flato M., Simon J., Sternheimer D. Simple facts about analytic vectors and integrability / M. Flato, J. Simon, H. Snellman, D. Sternheimer // Ann. Sci. Ecole Norm. Sup. –1972. – 4 no. 5. –P. 423–434.
3. Goodman R. Analytic domination by fractional powers of a positive operator / R. Goodman // J. Funct. Anal. –1969. – 3. –P. 246–264.
4. Jørgensen P. E. T., Schmitt L.M., Werner R.F. Positive representations of general commutation relations allowing Wick ordering / P. E. T. Jørgensen, L. M. Schmitt and R. F. Werner // J. Funct. Anal. –1995. – 134. – P. 33-99.
5. Nelson E. Analytic vectors / E. Nelson // Ann. of Math. –1959. –70 no. 2. –P. 572–615.
6. Ostrovskiy V., Proskurin D., Turowska L. and Savchuk Yu, On the structure of homogeneous Wick ideals in Wick *-algebras with braided coefficients / V. Ostrovskiy, D. Proskurin, L. Turowska and Yu. Savchuk // Rev. Math. Phys. –2012. –24 no.4. –P. 1250007

References

1. BEREZANSKYI Yu. M., US G.F., SHEFTEL Z.G. (1990), Functional Analysys, Kyiv: Vyscha Shkola.
2. FLATO M., SIMON J., STERNHEIMER D. (1972), “Simple facts about analytic vectors and integrability”, *Ann. Sci. Ecole Norm. Sup.*, 4 no. 5., pp. 423–434.
3. GOODMAN R. (1969), “Analytic domination by fractional powers of a positive operator”, *J. Funct. Anal.*, 3, pp. 246–264.
4. JØRGENSEN P. E. T., SCHMITT L.M., WERNER R.F. (1995), “Positive representations of general commutation relations allowing Wick ordering”, *J. Funct. Anal.*, 134, pp. 33-99.
5. NELSON E. (1959), “Analytic vectors”, *Ann. of Math.*, 70 no. 2, pp. 572–615.
6. OSTROVSKYI V., PROSKURIN D., TUROWSKA L., SAVCHUK Yu. (2012), “On the structure of homogeneous Wick ideals in Wick *-algebras with braided coefficients”, *Rev. Math. Phys*, 24 no.4, p. 1250007

Received: 20.01.2016

**ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ
РІВНЯННЯ,
МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА
ТА МЕХАНІКА**

УДК 539.3

Клімчук Т. В.¹, аспірант
Острик В. І.¹, д. ф.-м. н., проф.

**Фрикційний контакт двох півнескінчених
штампів і пружної смуги**

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

T. V. Klimchuk¹, postgraduate
V. I. Ostryk¹, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof.

**Frictional contact problem for two semi-infinite
punches and an elastic strip**

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

Розглянуто контактну задачу для пружної смуги, нижня грань якої жорстко закріплена, а у верхню грань під дією рівномірно розподілених нормального та дотичного навантажень вдавлюються два півнескінчених штампи з прямолінійними основами. В області контакту враховано сили тертя. Інтегральне рівняння задачі за допомогою методу Вінера – Гопфа зведено, спершу, до системи функціональних рівнянь, а потім – до нескінченної системи алгебричних рівнянь. Визначено розподіли контактних напружень, нормальних та дотичних напружень на закріпленій грані смуги та розподіли нормальних переміщень точок вільної від навантаження частини верхньої грані смуги.

Ключові слова: пружна смуга, півнескінченні штампи, метод Вінера – Гопфа, напруження.

In presented paper the frictional contact problem is considered for two semi-infinite punches with straight-line bases and an elastic strip with rigidly fixed bottom line. Using the Fourier integral transformation, the corresponding mixed boundary value problem of elasticity for the strip is reduced to the integral equation at two semi-infinite intervals with different difference kernels. Applying the Wiener – Hopf method, the integral equation is reduced, first, to the system of functional equations and second to an infinite system of algebraic equations with exponentially vanishing coefficients. The solution of the last system is obtained in the form of the series containing the powers of a small parameter. The factorization of the functional equation coefficients is performed in the form of the infinite products containing the roots of the transcendental equations. The analytical expressions are obtained for the contact stress and the normal displacement of the load-free part of the upper strip line in the form of the exponentially convergent power series. The complex combination of normal and tangential stresses on the fixed strip line is presented in quadratures. Calculation of stresses and displacement is performed for the different values of the dimensionless distance between the punches and the friction coefficient.

Key words: elastic strip, semi-infinite punches, Wiener – Hopf method, stress.

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

Вступ

Контактна взаємодія півнескінченного штампа з прямолінійною горизонтальною основою та пружної смуги розглядалася в роботах [1, 2] без урахування тертя та в роботі [3] з урахуванням тертя в області контакту. Точні розв'язки цих задач було знайдено за допомогою методу Вінера – Гопфа. Контактна взаємодія двох скінчених штампів з прямолінійними горизонтальними основами та пружної смуги у випадку відсутності тертя вперше розглядалася в роботі [4], де знайдено наближений розв'язок за допомогою асимптотичного методу. В роботі [5] із застосуванням методу послідовних наближень розв'язано задачу

про гладкий контакт двох півнескінчених штампів із довільною формою основ та пружної смуги. У випадку півнескінчених штампів із прямолінійними основами аналогічну задачу розв'язано в [6] із застосуванням методу Вінера – Гопфа. Вплив тертя на контактну взаємодію пружної смуги з двома штампами раніше не досліджувався.

Дана робота присвячена знаходженню точного аналітичного розв'язку контактної задачі для смуги з двома півнескінченими штампами та дослідженню впливу тертя і відносної відстані між штампами на розподіли контактних напружень, напружень на закріпленій грані смуги, а також на нормальні переміщення вільної частини межі смуги.

Постановка задачі

Розглянемо пружну смугу $-\infty < x < \infty$, $-h \leq y \leq h$ товщини $2h$ в стані плоскої деформації (рис. 1). Вважатимемо, що нижня грань $y = -h$ ($-\infty < x < \infty$) смуги жорстко закріплена. У верхню грань $y = h$ смуги на проміжках $-\infty < x \leq -l$ та $0 \leq x < \infty$ вдавлюються два півнескінченних штампи з прямолінійними основами. На правий штамп ($0 \leq x < \infty$) діють рівномірно розподілені нормальне та дотичне навантаження інтенсивностей p_1 ($p_1 > 0$) та q_1 відповідно, а на лівий штамп ($-\infty < x \leq -l$) – навантаження інтенсивностей p_2 ($p_2 > 0$) та q_2 . Частина $-l < x < 0$ верхньої грані $y = h$ смуги між штампами вільна від навантаження. В області контакту $-\infty < x \leq -l$, $0 \leq x < \infty$, $y = h$ нормальні та дотичні напруження задовольняють закон тертя Амонтона. Для інтенсивностей нормальних p_1 , p_2 та дотичних q_1 , q_2 навантажень виконуються рівності $q_1 = \mu_1 p_1$, $q_2 = \mu_2 p_2$, де $|\mu_1|$, $|\mu_2|$ – коефіцієнти тертя, які забезпечують повне проковзування основ штампів уздовж межі смуги.

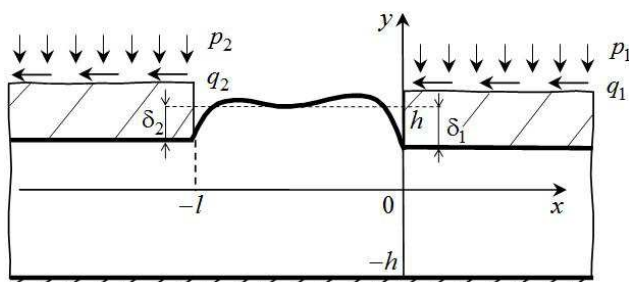


Рис. 1. Взаємодія штампів з пружною смугою

Крайові умови задачі мають вигляд

$$\begin{aligned} u_y|_{y=h} &= -\delta_1, \quad \tau_{xy}|_{y=h} = \mu_1 \sigma_y|_{y=h} \quad (0 < x < \infty), \\ u_y|_{y=h} &= -\delta_2, \quad \tau_{xy}|_{y=h} = \mu_2 \sigma_y|_{y=h} \quad (-\infty < x < -l), \\ \sigma_y|_{y=h} &= 0, \quad \tau_{xy}|_{y=h} = 0 \quad (-l < x < 0), \\ u_x|_{y=-h} &= 0, \quad u_y|_{y=-h} = 0 \quad (-\infty < x < \infty), \end{aligned} \quad (1)$$

де δ_1 та δ_2 – просідання смуги під правим та лівим штампами відповідно. Із умов на нескінченності ($x \rightarrow \pm\infty$) знаходимо [3]:

$$\delta_1 = \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{p_1 h}{G}, \quad \delta_2 = \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{p_2 h}{G}, \quad (2)$$

де ν – коефіцієнт Пуассона, G – модуль зсуву.

Інтегральне рівняння задачі та його розв'язання

Уведемо невідому функцію нормальних контактних напружень

$$\sigma(x) = \frac{1}{2G} \sigma_y|_{y=h} \quad (-\infty < x \leq -l, \quad 0 \leq x < \infty) \quad (3)$$

та її трансформанту Фур'є

$$\tilde{\sigma}(\mu) = \frac{1}{2\pi} \left(\int_{-\infty}^{-l} + \int_0^{\infty} \right) \sigma(r) e^{i\mu r} dr. \quad (4)$$

Розглянемо основну змішану крайову задачу для смуги, коли на грані $y = h$ задано нормальні $2G\sigma(x)$ та дотичні $2G\mu_0\sigma(x)$ напруження ($\mu_0 = \mu_1$, $0 \leq x < \infty$; $\mu_0 = \mu_2$, $-\infty < x \leq -l$), а на грані $y = -h$ – нульові переміщення. Розв'язок знаходимо за допомогою інтегрального перетворення Фур'є. Виконавши заміни змінних

$$x = 2h\xi, \quad r = 2h\eta, \quad \tau = 2\mu h, \quad a = l/(2h), \quad (5)$$

на грані $y = h$ смуги матимемо

$$u_y|_{y=h} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\lambda(\tau)}{\tau \Delta(\tau)} \tilde{\sigma}\left(\frac{\tau}{2h}\right) e^{-i\tau\xi} d\tau,$$

$$\lambda(\tau) = \lambda_1(\tau) \quad (0 \leq \tau < \infty), \quad \lambda(\tau) = \lambda_2(\tau) \quad (-\infty < \tau \leq -a),$$

$$\lambda_j(\tau) = \lambda_{j1}(\tau) + \mu_j \lambda_{j2}(\tau), \quad j = 1, 2,$$

$$\lambda_{11}(\tau) = 2(1-\nu)[(3-4\nu)\text{sh } 2\tau - 2\tau],$$

$$\lambda_{12}(\tau) = -2i[(3-4\nu)(1-2\nu)\text{sh}^2 \tau - \tau^2],$$

$$\Delta(\tau) = (3-4\nu)(\text{ch } 2\tau - 1) + 2\tau^2 + 8(1-\nu)^2. \quad (6)$$

Розв'язок (6) основної змішаної задачі задовольняє всі крайові умови (1), окрім умов для нормальних переміщень на верхній грані.

Функцію контактних напружень подамо у вигляді

$$\sigma(x) = -\frac{p_1}{2G} + \sigma_*(x), \quad \sigma_*(\infty) = 0 \quad (x \geq 0),$$

$$\sigma(x) = -\frac{p_2}{2G} + \sigma_*(x), \quad \sigma_*(-\infty) = 0 \quad (x \leq -l). \quad (7)$$

Подання (6) підставимо у крайові умови (1) для нормальних переміщень на верхній грані смуги. Відносно нової невідомої функції

$$\varphi(\xi) = -\sqrt{2\pi} \frac{2h}{\delta_1} \sigma_*(2h\xi) \quad (\xi < -a, \quad \xi > 0) \quad (8)$$

отримаємо інтегральне рівняння

$$L(\xi) \equiv \int_0^{\infty} k_1(\xi-\eta)\varphi(\eta)d\eta + \int_{-\infty}^{-a} k_2(\xi-\eta)\varphi(\eta)d\eta = f(\xi) \quad (-\infty < \xi < -a, \quad 0 < \xi < \infty), \quad (9)$$

$$k_j(\xi - \eta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K_j(\tau) e^{-i\tau(\xi - \eta)} d\tau, \quad K_j(\tau) = \frac{\lambda_j(\tau)}{\tau \Delta(\tau)},$$

$$f(\xi) = \frac{\sqrt{2\pi}}{2} \left[1 + \frac{p_2}{p_1} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{K_1(\tau)}{K_1(0)} - \frac{p_2}{p_1} \frac{K_2(\tau)}{K_2(0)} e^{-i\tau a} \right) \frac{e^{-i\tau \xi}}{i\tau} d\tau \right].$$

Рівняння (9) є інтегральним рівнянням на двох півнескінченних інтервалах з різними різнице-вими ядрами. Для його розв'язання використаємо процедури методу Вінера – Гопфа [7] і підхід роботи [6], де розв'язано аналогічне рівняння з однаковими ядрами.

Відносно функцій комплексної змінної

$$\Phi^+(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} \varphi(\xi) e^{iz\xi} d\xi,$$

$$\Phi^-(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 \varphi(\xi - a) e^{iz\xi} d\xi,$$

$$\Psi^+(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^a L(\xi - a) e^{iz\xi} d\xi,$$

$$\Psi^-(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^0 L(\xi) e^{iz\xi} d\xi. \quad (10)$$

серед яких функції $\Phi^+(z)$, $\Phi^-(z)$ аналітичні у півплощинах $\text{Im } z > c^+$, $\text{Im } z < c^-$ ($c^+ < 0$, $c^- > 0$) відповідно, а функції $\Psi^+(z)$, $\Psi^-(z)$ – цілі, отримаємо систему функціональних рівнянь

$$K_1(z)\Phi^+(z) + e^{-iza}K_2(z)\Phi^-(z) - \Psi^-(z) = F(z),$$

$$\Psi^+(z) = e^{iza}\Psi^-(z) \quad (c^+ < \text{Im } z < c^-) \quad (11)$$

з правою частиною

$$F(z) = F^+(z) + e^{-iza}F^-(z), \quad F^+(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} f(\xi) e^{iz\xi} d\xi,$$

$$F^-(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 f(\xi - a) e^{iz\xi} d\xi. \quad (12)$$

Після факторизації коефіцієнтів

$$K_j(z) = K_j(0)K_j^+(z)K_j^-(z), \quad K_j(0) = \frac{1-2\nu}{1-\nu},$$

$$K_j^+(z) = \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + \frac{iz}{\zeta_k^{(j)'}} \right) \left(1 - \frac{iz}{s_k} \right)^{-1},$$

$$K_j^-(z) = \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + \frac{iz}{\zeta_k^{(j)}} \right) \left(1 + \frac{iz}{s_k} \right)^{-1} \quad (j=1, 2) \quad (13)$$

через корені $\zeta_k^{(j)}$ і $\zeta_k^{(j)'}$ ($k=1, 2, \dots$) рівнянь $\lambda_j(is) = 0$ ($j=1, 2$) із півплощин $\text{Re } s > 0$ і $\text{Re } s < 0$ відповідно та корені s_k ($k=1, 2, \dots$) рівняння $\Delta(is) = 0$ із півплощини $\text{Re } s > 0$, рівняння (11) запишемо у вигляді

$$K_1(0)K_1^+(z)\Phi^+(z) + e^{-iza}\frac{K_2(z)}{K_1^-(z)}\Phi^-(z) - \frac{\Psi^-(z)}{K_1^-(z)} =$$

$$= e^{-iza}\frac{F^-(z)}{K_1^-(z)} + \frac{F^+(z)}{K_1^-(z)},$$

$$K_2(0)K_2^-(z)\Phi^-(z) + e^{iza}\frac{K_1(z)}{K_2^+(z)}\Phi^+(z) - \frac{\Psi^+(z)}{K_2^+(z)} =$$

$$= e^{iza}\frac{F^+(z)}{K_2^+(z)} + \frac{F^-(z)}{K_2^+(z)} \quad (c^+ < \text{Im } z < c^-). \quad (14)$$

Окремі складові рівнянь (14), які не є аналітичними у півплощинах $\text{Im } z > c^+$, $\text{Im } z < c^-$, подамо різницею аналітичних у цих півплощинах функцій:

$$e^{-iza}\frac{K_2(z)}{K_1^-(z)}\Phi^-(z) = \chi_1^-(z) - \chi_1^+(z), \quad (15)$$

$$-e^{iza}\frac{K_1(z)}{K_2^+(z)}\Phi^+(z) = \chi_2^+(z) - \chi_2^-(z),$$

$$\frac{F^+(z)}{K_1^-(z)} = f_1^+(z) - f_1^-(z), \quad -\frac{F^-(z)}{K_2^+(z)} = f_2^+(z) - f_2^-(z).$$

Кожну з функцій із правих частин рівностей (15) відшукуємо у вигляді інтегралів типу Коші з відповідними густинами із лівих частин цих рівностей. Розвинувши інтеграли в ряди за теорією лишків, отримаємо

$$\chi_1^+(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\alpha_k^-}{s_k - iz} \Phi^-(-is_k) e^{-s_k a},$$

$$\chi_2^-(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\alpha_k^+}{s_k + iz} \Phi^+(is_k) e^{-s_k a},$$

$$f_1^+(z) = \frac{K_1^+(z) - 1}{iz} - \frac{p_2}{p_1} \frac{1}{K_2(0)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\alpha_k^-}{s_k (s_k - iz)} e^{-s_k a},$$

$$f_2^-(z) = \frac{p_2}{p_1} \frac{1 - K_2^-(z)}{iz} - \frac{1}{K_1(0)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\alpha_k^+}{s_k (s_k + iz)} e^{-s_k a},$$

$$\alpha_k^- = -\frac{\lambda_2(-is_k)}{s_k \Delta'(is_k) K_1^-(-is_k)}, \quad \alpha_k^+ = \frac{\lambda_1(is_k)}{s_k \Delta'(is_k) K_2^+(is_k)}$$

$$(k=1, 2, \dots). \quad (16)$$

З урахуванням подань (15) система рівнянь (14) набуває вигляду

$$K_1(0)K_1^+(z)\Phi^+(z) + \chi_1^+(z) - f_1^+(z) =$$

$$= \frac{\Psi^-(z)}{K_1^-(z)} + e^{-iza}\frac{F^-(z)}{K_1^-(z)} + \chi_1^-(z) - f_1^-(z),$$

$$K_2(0)K_2^-(z)\Phi^-(z) + \chi_2^-(z) - f_2^-(z) =$$

$$= \frac{\Psi^+(z)}{K_2^+(z)} + e^{iza}\frac{F^+(z)}{K_2^+(z)} + \chi_2^+(z) - f_2^+(z)$$

$$(c^+ < \text{Im } z < c^-). \quad (17)$$

Для кожного рівняння (17) ліва і права частини аналітично продовжують одна одну на всю комплексну площину і являють собою цілу функцію. Використовуючи оцінки

$$\begin{aligned} K_1^+(z) &= O(z^{-1/2+\gamma_1}), \quad K_2^-(z) = O(z^{-1/2-\gamma_2}), \\ \gamma_j &= \frac{1}{\pi} \arctg \frac{\mu_j(1-2\nu)}{2(1-\nu)} \quad (j=1, 2), \\ \chi_1^+(z), \chi_2^-(z), f_1^+(z), f_2^-(z) &= O(z^{-1}), \\ \Phi^+(z), \Phi^-(z) &= o(1), \quad |z| \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (18)$$

заключаємо, що кожна із зазначених цілих функцій тотожно дорівнює нулеві. Отже, знаходимо розв'язок системи функціональних рівнянь (11) у вигляді

$$\begin{aligned} \Phi^+(z) &= \frac{f_1^+(z) - \chi_1^+(z)}{K_1(0)K_1^+(z)}, \\ \Phi^-(z) &= \frac{f_2^-(z) - \chi_2^-(z)}{K_2(0)K_2^-(z)}, \\ \Psi^+(z) &= K_2^+(z) [f_2^+(z) - \chi_2^+(z)] - e^{iza} F^+(z), \\ \Psi^-(z) &= K_1^-(z) [f_1^-(z) - \chi_1^-(z)] - e^{-iza} F^-(z). \end{aligned} \quad (19)$$

Поклавши у першій рівності (19) $z = is_n$, а в другій $z = -is_n$, отримаємо нескінченну систему алгебричних рівнянь

$$\begin{aligned} z_n^+ + \beta_n^+ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tilde{\alpha}_k^-}{s_k + s_n} z_k^- \lambda_0^k &= g_n^+, \\ z_n^- + \beta_n^- \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tilde{\alpha}_k^+}{s_k + s_n} z_k^+ \lambda_0^k &= g_n^- \quad (n=1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (20)$$

відносно невідомих

$$\begin{aligned} z_k^+ &= \Phi^+(is_k) + \frac{1}{K_1(0)s_k}, \\ z_k^- &= \Phi^-(-is_k) + \frac{p_2}{p_1} \frac{1}{K_2(0)s_k} \quad (k=1, 2, \dots), \end{aligned} \quad (21)$$

у якій на підставі асимптотики коренів $s_k \sim \pi k/2$, $k \rightarrow \infty$, уведено малий параметр $\lambda_0 = e^{-\pi a/2} = e^{-\pi l/(4h)}$ ($0 < \lambda_0 < 1$) та коефіцієнти

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_k^{\pm} &= \alpha_k^{\pm} e^{-(s_k - \pi k/2)a}, \quad \beta_n^+ = \frac{1}{K_1(0)K_1^+(is_n)}, \\ \beta_n^- &= \frac{1}{K_2(0)K_2^-(-is_n)}, \quad g_n^+ = \frac{\beta_n^+}{s_n}, \quad g_n^- = \frac{p_2}{p_1} \frac{\beta_n^-}{s_n} \\ &\quad (k, n=1, 2, \dots). \end{aligned} \quad (22)$$

Відшукаючи розв'язок системи рівнянь (20) у вигляді

$$z_k^{\pm} = \sum_{m=0}^{\infty} \xi_{km}^{\pm} \lambda_0^m \quad (k=1, 2, \dots), \quad (23)$$

знаходимо

$$\xi_{n0}^{\pm} = g_n^{\pm} \quad (24)$$

та отримуємо рекурентні співвідношення

$$\xi_{nm}^{\pm} = -\beta_n^{\pm} \sum_{k=1}^m \frac{\tilde{\alpha}_k^{\mp}}{s_k + s_n} \xi_{k,m-k}^{\mp} \quad (25)$$

для визначення коефіцієнтів $\xi_{nm}^{\pm}$ ($n, m=1, 2, \dots$).

Розв'язок $\Phi(\xi)$ інтегрального рівняння (9) знайдемо, застосовуючи обернене перетворення Фур'є до рівності

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\int_0^{\infty} + \int_{-\infty}^{-a} \right) \Phi(\xi) e^{iz\xi} d\xi = \Phi^+(z) + e^{-iza} \Phi^-(z). \quad (26)$$

Для $\xi > 0$ з урахуванням (19) матимемо

$$\begin{aligned} \Phi(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^+(t) e^{-it\xi} dt = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{t\Delta(t)K_1^-(t)}{\lambda_1(t)} [f_1^+(t) - \chi_1^+(t)] e^{-it\xi} dt. \end{aligned} \quad (27)$$

Визначення напружень та переміщень

Нормальні контактні напруження вздовж основи правого штампа знайдемо, використавши заміни (3), (8) та обчисливши останній інтеграл із (27) через лишки. Маємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{p_1} \sigma_y \Big|_{y=h} &= -1 - K_1(0) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\zeta_k^{(1)'} \Delta(i\zeta_k^{(1)'})}{\lambda_1'(i\zeta_k^{(1)'})} K_1^-(i\zeta_k^{(1)'}) \times \\ &\times \left(\frac{1}{\zeta_k^{(1)'}} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tilde{\alpha}_n^-}{s_n + \zeta_k^{(1)'}} \lambda_0^n z_n^- \right) e^{\zeta_k^{(1)'} \xi} \quad (0 < \xi < \infty). \end{aligned} \quad (28)$$

Нормальні переміщення на вільній частині верхньої грані смуги отримуємо у вигляді

$$\begin{aligned} u_y \Big|_{y=h} &= -\delta_1 \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda_1(is_k)}{s_k \Delta'(is_k)} z_k^+ e^{s_k \xi} - \right. \\ &\left. - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda_2(-is_k)}{s_k \Delta'(is_k)} z_k^- e^{-s_k(a+\xi)} \right) \quad (-a < \xi < 0). \end{aligned} \quad (29)$$

Напруження на нижній грані смуги знаходимо у вигляді комплексної комбінації

$$\begin{aligned} \frac{1}{p_1} (\sigma_y + i\tau_{xy}) \Big|_{y=-h} &= -\frac{1}{2} \left[1 + \frac{p_2}{p_1} + i(\mu_1 + \mu_2 \frac{p_2}{p_1}) \right] + \\ &+ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M(\tau)}{\Delta(\tau)} e^{-i\tau\xi} d\tau \quad (-\infty < \xi < \infty), \\ M(\tau) &= 4(1-\nu) \left[\frac{\hat{\lambda}_1(\tau) - i\mu_1 \hat{\lambda}_2(\tau)}{K^+(\tau)} \left(\frac{1}{i\tau} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tilde{\alpha}_k^- \lambda_0^k z_k^-}{s_k - i\tau} \right) - \right. \end{aligned}$$

$$\frac{(\hat{\lambda}_1(\tau) - i\mu_2 \hat{\lambda}_2(\tau)) e^{-i\tau a}}{K_2^-(\tau)} \left(\frac{p_2}{p_1} \frac{1}{i\tau} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tilde{\alpha}_k^+ \lambda_0^k z_k^+}{s_k + i\tau} \right),$$

$$\hat{\lambda}_j(\tau) = [\tau - 2(-1)^j(1-\nu)] \operatorname{ch} \tau + [\tau + (-1)^j(1-2\nu)] \operatorname{sh} \tau$$

$$(j = 1, 2). \quad (30)$$

Результати обчислень

Розрахунки проведено для коефіцієнта Пуассона $\nu = 1/3$ та різних значень відносної відстані $a = l/(2h)$ між штампами. Пунктирні криві на рис. 2–5 відповідають відсутності тертя в області контакту, штрих-пунктирні та суцільні криві – проковзуванню штампів вправо та вліво відповідно зі значенням коефіцієнта тертя 0.25. Випадок $a = \infty$ відповідає контактній взаємодії одного півнескінченного штампа та пружної смуги [3].

На рис. 2 показано розподіли безрозмірних контактних напружень $\bar{\sigma} = \frac{1}{p_1} \sigma_y|_{y=h}$, обчислених за формулою (28).

На рис. 3 зображено безрозмірні нормальні переміщення $\bar{u} = \frac{1}{\delta_1} u_y|_{y=h}$ вільної від навантаження частини ($-l < x < 0$) верхньої грані смуги, а у табл. 1 подано їхні максимальні значення $\bar{u}_{\max}$ для випадків фрикційного проковзування штампів назустріч один одному ($\mu_1 = 0.25$, $\mu_2 = -0.25$)

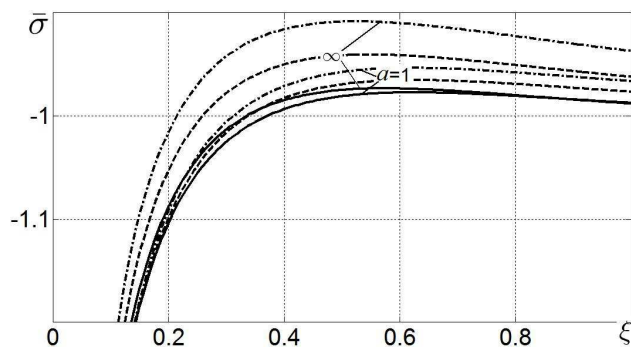


Рис. 2. Розподіли контактних напружень ($y = h$)

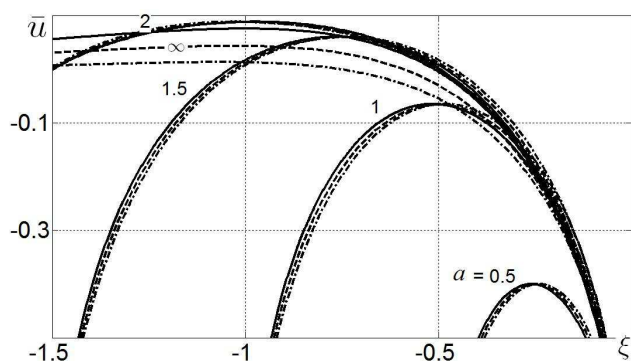


Рис. 3. Розподіли нормальних переміщень ($y = h$)

Таблиця 1

a	$\bar{u}_{\max}$		
	$\mu_1 = 0.25$ $\mu_2 = -0.25$	$\mu_1 = 0$ $\mu_2 = 0$	$\mu_1 = -0.25$ $\mu_2 = 0.25$
0.2	-0.744	-0.737	-0.731
0.5	-0.389	-0.401	-0.412
1	-0.018	-0.066	-0.111
1.193	0.0570	0	-0.054
1.5	0.1239	0.0593	-0.002
2	0.1528	0.0871	0.0249
2.052	0.1525	0.0873	0.0255
2.5	0.1384	0.0789	0.0223
3	0.1124	0.0618	0.0137
5	0.0803	0.0457	0.0123
7	0.0761	0.0436	0.0128
9	0.0754	0.0434	0.0129
11	0.0753	0.0433	0.0129
13	0.0752	0.0433	0.0129

та в різні боки ($\mu_1 = -0.25$, $\mu_2 = 0.25$), а також у випадку гладкого контакту ($\mu_1 = 0$, $\mu_2 = 0$) [6]. Значення $\bar{u}_{\max}$ в останньому випадку практично не відрізняються від випадків фрикційного проковзування штампів вліво або вправо, зокрема для $\mu_1 = \mu_2 = 0.25$ та $\mu_1 = \mu_2 = -0.25$.

На рис. 4 і 5 показано розподіли нормальних $\bar{\sigma} = \frac{1}{p_1} \sigma_y|_{y=-h}$ і дотичних $\bar{\tau} = \frac{1}{p_1} \tau_{xy}|_{y=-h}$ напру-

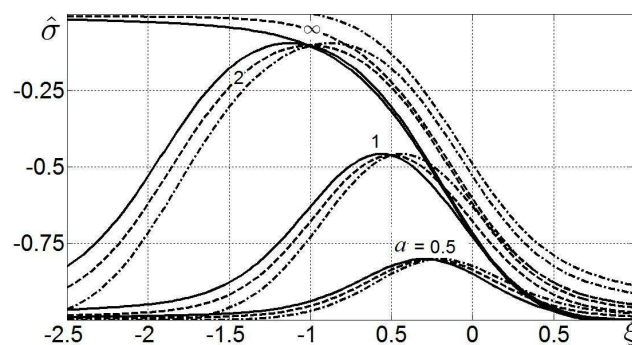


Рис. 4. Розподіли нормальних напружень ($y = -h$)

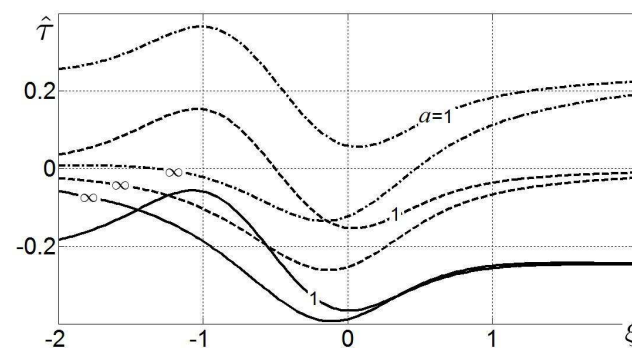


Рис. 5. Розподіли дотичних напружень ($y = -h$)

жень, нормованих величиною p_1 , на нижній гра-
ні $y = -h$ смуги.

Зауважимо, що коли, наприклад, інтенсивність p_2 нормального навантаження, що діє на лівий штамп, менше за p_1 , а відстань між штампами відносно мала, край лівого штамп може вийти із контакту. У такому разі вважаємо, що ліва частина $-\infty < x \leq -l$ області контакту знаходиться всередині основи лівого штамп, а розмір $l = l_*$ невідомий. Для визначення останнього слугує умова обмеженості нормальних контактних напружень у точці $x = -l_*$. У табл. 2 у випадку неповного контакту лівого штамп зі смугою наведено значення $a_* = l_*/(2h)$ відносної відстані між підобластями контакту для різних значень $p_2/p_1 < 1$ та різних варіантах проковзування.

Таблиця 2

p_2/p_1	a_*		
	$\mu_1 = 0$ $\mu_2 = 0$	$\mu_1 = -0.25$ $\mu_2 = -0.25$	$\mu_1 = 0.25$ $\mu_2 = 0.25$
0.1	0.477	0.485	0.444
0.25	0.316	0.301	0.303
0.5	0.167	0.143	0.161
0.75	0.073	0.045	0.067
p_2/p_1	a_*		
	$\mu_1 = 0.25$ $\mu_2 = -0.25$	$\mu_1 = -0.25$ $\mu_2 = 0.25$	
0.1	0.433	0.498	
0.25	0.291	0.314	
0.5	0.149	0.156	
0.75	0.053	0.061	

Список використаних джерел

1. Альперин И. Г. Напряжения в бесконечной полосе, равномерно сжатой на половине длины / И. Г. Альперин // Записки науч.-исслед. института мат. и мех. ХГУ и Харьков. мат. общ-ва. – 1950. – Том XX. – С. 107–118.
2. Улитко А. Ф. Смешанная задача теории упругости для полосы на жестком основании / А. Ф. Улитко, В. И. Острик // Тр. III Всерос. конф. по теории упругости с междунар. участием. – Ростов-на-Дону: Новая книга. – 2004. – С. 372–375.
3. Клімчук Т. В. Ковзний контакт напівнескінченного штамп з пружною смугою / Т. В. Клімчук, В. І. Острик // Вісник Київ. ун-ту. Сер.: фіз.-мат. науки. – 2015. – Вип. 2. – С. 75–78.
4. Александров В. М. Некоторые задачи о действии двух штампов на упругую полосу / В. М. Александров, В. А. Кучеров // Изв. АН СССР. Механика твердого тела. – 1968. – № 4. – С. 110–123.
5. Кучеров В. А. Действие двух полубесконечных штампов на упругую полосу малой толщины / В. А. Кучеров // Изв. АН СССР. Механика твердого тела. – 1973. – № 1. – С. 120–126.
6. Клімчук Т. В. Вдавлення двох півнескінчених штампів у пружну смугу / Т. В. Клімчук, В. І. Острик // Вісник Київ. ун-ту. Сер.: фіз.-мат. науки. – 2016. – Вип. 4. – С. 41–46.
7. Нобл Б. Метод Винера – Хопфа / Б. Нобл. – Москва: Изд. иностр. лит. – 1962. – 280 с.

References

1. ALPERIN, I. G. (1950) Naprjazhenija v beskonечноy polose, ravnomerno szhatoy na polovine dliny. *Zapiski nauch.-issled. instituta mat. i meh. HGU i Harkov. mat. obschestva*. Tom XX. P. 107–118.
2. ULITKO, A. and OSTRIK, V. (2004) Smeshannaja zadacha teorii uprugosti dlja polosy na zestkom osnovanii. *Trudy III Vserosiiskoi konferentsii po teorii uprugosti*. Rostov-na-Donu: Novaja kniga. P. 372–375.
3. KLIMCHUK, T. V. and OSTRIK, V. I. (2015) Kovznyi kontakt napivneskinchenogo shtampa z pruzhnoju smugoju. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physics & Mathematics*. Vyp. 2. P. 75–78.
4. ALEKSANDROV, V. M. and KUCHEROV, V. A. (1968) Nekotorye zadachi o deystvii dvuh shtampov na upruguju polosu. *Izv. UN SSSR. Mehanika tverdogo tela*. N 4. P. 110–123.
5. KUCHEROV, V. A. (1973) Deystvie dvuh polubeskonechnih shtampov na upruguju polosu maloy tolshchiny. *Izv. AN SSSR. Mehanika tverdogo tela*. N 1. P. 120–126.
6. KLIMCHUK, T. V. and OSTRIK, V. I. (2016) Vdavljuvannja dvoh pivneskinchennih shtampiv u pruzhnu smugu. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physics & Mathematics*. Vyp. 4. P. 41–46.
7. NOBL, B. (1958) *Methods based on the Wiener – Hopf technique*. London – New York – Paris – Los Angeles.

Надійшла до редколегії 17.08.17

УДК 539.3

Рожок Л. С., к.ф.-м.н., доц.

**Рівновага порожнистих некругових
циліндрів при зміні форми їх поперечного
перерізу**

Національний транспортний університет, 01010,
м. Київ, вул. М. Омеляновича-Павленка, 1,
e-mail: r.l.s@ua.fm

Liliya S. Rozhok, Ph.D., (Phys.-Math.), Ass. Prof.

**Equilibrium non-circular hollow
cylinders by changing the shape of the cross
section**

National Transport University, 01010, Kyiv, M.
Omelyanovicha-Pavlenka, 1,
e-mail: r.l.s@ua.fm

Розв'язання задачі про рівновагу порожнистих ізотропних некругових циліндрів дано в просторовій постановці при певних граничних умовах на торцях. Поперечний переріз циліндрів, що розглядаються описаний рівняннями овалів Касині. При цьому застосовуються: метод відокремлення змінних вздовж твірної та прямої циліндра, метод апроксимації функцій дискретними рядами Фур'є та стійкий чисельний метод дискретної ортогоналізації. Наводяться результати розрахунків у вигляді розподілу полів переміщень та напружень.

Ключові слова: некругові порожнисті циліндри, овали Касині, дискретні ряди Фур'є, метод дискретної ортогоналізації, напружений стан.

The paper considers solving the problem on equilibrium of noncircular hollow cylinders is performed in spatial formulation at certain boundary conditions at the ends.

Object of study – a hollow cylinder which noncircular cross sections. The cross section of these cylinders is described by the Cassini ovals equations.

Purpose – investigation of influence of the cross section shape on the stress state of noncircular hollow cylinders.

The paper presents a nontraditional approach to solving boundary-value problems on stress state of spatial bodies. The approach is based on the reduction of two-dimensional problems to one-dimensional one using the discrete Fourier series. The two-dimensional problem contains the geometrical and mechanical parameters as the multipliers on solving functions what makes it impossible to separate variables. Introduction of additional functions, which include resolving functions, and their derivatives together with indicated multipliers, allows to reduce the problem to one-dimensional one through expansion of all the functions into the Fourier series in one coordinate direction. In integrating the one-dimensional boundary-value problem, the amplitude values of additional functions are determined through the Fourier series of functions which are specified at the discrete set of points. The one-dimensional boundary-value problem is solved by the stable numerical method of discrete orthogonalization.

The results of the paper can be used when selecting the cross section of the cylinders of a similar type.

Key words: noncircular hollow cylinders, Cassini ovals, discrete Fourier series, discrete-orthogonalization method, hollow cylinders, stress state.

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

Циліндричні оболонки – один із найважливіших елементів літаків, ракет, підводних човнів. У будівництві вони знаходять широке застосування у конструкціях будівель, резервуарів, газгольдерів, трубопроводів [1, 2].

При розробці нових конструкцій машин, обладнання, споруд саме на ранніх стадіях проектування для прийняття проектно-конструкторських рішень необхідною стає інформація про вплив на напружений стан як

конструктивних параметрів, так і властивостей матеріалу, з яких вони виготовлятимуться.

Така інформація за відсутності експериментальних даних може бути отримана тільки за допомогою теоретичних моделей. Розробка перспективних видів конструкцій залежить від наявності випереджаючих розробок ефективних засобів математичного моделювання.

Метою даної роботи є дослідження впливу на напружений стан некругових ізотропних

порожнистих циліндрів зміни форми їх поперечного перерізу.

Постановка задачі та метод розв'язування.

Розглядаються порожнисті некругові циліндри під дією внутрішнього тиску.

Перша квадратична форма в ортогональній криволінійній системі координат записується у вигляді

$$dS^2 = ds^2 + H_2^2(\psi, \gamma) d\psi^2 + d\gamma^2, \quad (1)$$

де s, ψ, γ ортогональні криволінійні координати: s - довжина дуги по твірній, ψ - полярний кут в поперечному перерізі, γ - нормальна координата по товщині циліндра.

Будемо розглядати циліндри, з еліптичним та двома видами овального поперечного перерізу. В роботі [3] такі поперечні перерізи було описано трьома різними кривими. Подібні форми поперечного перерізу можна описати одним рівнянням для овалів Касині в полярній системі координат [4]

$$\rho = c \sqrt{\cos 2\varphi + \sqrt{\cos^2 2\varphi + \left(\frac{a^4}{c^4} - 1\right)}} \quad (0 \leq \psi \leq 2\pi),$$

$$0 \leq \frac{c}{a} < 1, a \neq 0, \quad (2)$$

де ρ - полярний радіус, c - половина відстані між фокусами, a - добуток відстаней від фокусів до довільної точки. Відношення параметрів c та a характеризує форму поперечного перерізу (рис.1). Так, якщо $c = 0$ - маємо коло (1), при $0 < \frac{c}{a} < \frac{1}{\sqrt{2}}$ - еліпс (2), $c = a\sqrt{2}$ - овал (3), $\frac{1}{\sqrt{2}} < \frac{c}{a} < 1$ - сплюснутий овал (4).

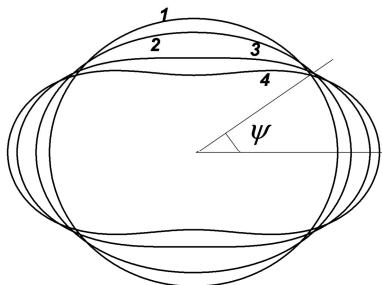


Рис. 1. Поперечний переріз поверхні відліку.

Тоді для параметру Ламе, коефіцієнту переходу від елементу дуги напрямної до кутового параметру ψ та радіуса кривизни

поверхні відліку, відповідно, маємо

$$H_2(\psi, \gamma) = \left(1 + \frac{\gamma}{R(\psi)}\right) \omega(\psi),$$

$$\omega(\psi) = \sqrt{\rho^2 + \left(\frac{d\rho}{d\psi}\right)^2}; \quad (3)$$

$$R(\psi) = \frac{a^2 \rho}{\rho^2 + c^2 \cos 2\varphi}.$$

За вихідні приймаються основні рівняння просторової теорії пружності.

Вирази деформацій через переміщення

$$e_s = \frac{\partial u_s}{\partial s}, \quad e_\psi = \frac{1}{H_2 \omega} \frac{\partial u_\psi}{\partial \psi} + \frac{1}{H_2} \frac{\partial H_2}{\partial \gamma} u_\gamma,$$

$$e_\gamma = \frac{\partial u_\gamma}{\partial \gamma}, \quad e_{s\psi} = \frac{1}{H_2 \omega} \frac{\partial u_s}{\partial \psi} + \frac{\partial u_\psi}{\partial s}, \quad e_{s\gamma} = \frac{\partial u_\gamma}{\partial s} + \frac{\partial u_s}{\partial \gamma},$$

$$e_{\psi\gamma} = H_2 \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\frac{u_\psi}{H_2} \right) + \frac{1}{H_2 \omega} \frac{\partial u_\gamma}{\partial \psi}; \quad (4)$$

рівняння рівноваги

$$H_2 \frac{\partial \sigma_s}{\partial s} + \frac{1}{\omega} \frac{\partial \tau_{s\psi}}{\partial \psi} + \frac{\partial}{\partial \gamma} (H_2 \tau_{s\gamma}) = 0,$$

$$\frac{1}{\omega} \frac{\partial \sigma_\psi}{\partial \psi} + \frac{\partial}{\partial \gamma} (H_2 \tau_{\psi\gamma}) + H_2 \frac{\partial \tau_{s\psi}}{\partial s} + \frac{\partial H_2}{\partial \gamma} \tau_{\psi\gamma} = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial \gamma} (H_2 \sigma_\gamma) + H_2 \frac{\partial \tau_{s\gamma}}{\partial s} + \frac{1}{\omega} \frac{\partial \tau_{\psi\gamma}}{\partial \psi} - \frac{\partial H_2}{\partial \gamma} \sigma_\psi = 0;$$

співвідношення закону Гука

$$e_s = a_{11} \sigma_s + a_{12} \sigma_\psi + a_{13} \sigma_\gamma,$$

$$e_\psi = a_{12} \sigma_s + a_{22} \sigma_\psi + a_{23} \sigma_\gamma,$$

$$e_\gamma = a_{13} \sigma_s + a_{23} \sigma_\psi + a_{33} \sigma_\gamma, \quad (6)$$

$$e_{\psi\gamma} = a_{44} \tau_{\psi\gamma}, \quad e_{s\gamma} = a_{55} \tau_{s\gamma}, \quad e_{s\psi} = a_{66} \tau_{s\psi},$$

де для ізотропного матеріалу маємо

$$a_{11} = a_{22} = a_{33} = \frac{1}{E}; \quad a_{12} = a_{13} = a_{23} = -\frac{\nu}{E};$$

$$a_{44} = a_{55} = a_{66} = \frac{2(1+\nu)}{E}. \quad (7)$$

На торцях циліндра припускаються граничні умови типу простого обпирання.

Обравши за розв'язувальні функції компоненти напружень і переміщень, після деяких перетворень можна отримати розв'язувальну систему диференціальних рівнянь в частинних похідних шостого порядку зі змінними коефіцієнтами.

Відокремивши змінні в напрямку твірної циліндра, подаючи розв'язувальні функції та компоненти навантаження у вигляді розвинень в ряди Фур'є вздовж твірної циліндра, отримуємо двовимірну крайову задачу, що описується розв'язувальною системою диференціальних рівнянь у частинних похідних більш високого порядку відносно амплітуд відповідних рядів Фур'є. Коефіцієнти отриманої розв'язувальної системи рівнянь містять параметри, що перешкоджають відокремленню змінних в напрямку прямої циліндра. Тоді, вводимо до розв'язувальної системи рівнянь доповняльні функції і отримуємо систему рівнянь, коефіцієнти якої, формально, не перешкоджатимуть відокремленню змінних в напрямку прямої [5]. Подаючи далі розв'язувальні, доповняльні функції та компоненти навантаження у вигляді розвинень в ряди Фур'є вздовж прямої циліндра, приходимо до одновірної крайової задачі відносно амплітуд відповідних рядів Фур'є, що описується системою звичайних диференціальних рівнянь у вигляді

$$\frac{d\sigma_{\gamma,n,k}}{d\gamma} = (c_2 - 1)\varphi_{1,k}^1 + \lambda_n \tau_{s\gamma,n,k} - \varphi_{4,k}^1 + b_{22}\varphi_{1,k}^5 - b_{12}\lambda_n \varphi_{1,k}^4 + b_{22}\varphi_{4,k}^3;$$

$$\frac{d\tau_{s\gamma,n,k}}{d\gamma} = -c_1\lambda_n \sigma_{\gamma,n,k} - \varphi_{1,k}^2 - b_{12}\lambda_n \varphi_{1,k}^3 + b_{11}\lambda_n^2 u_{s,n,k} - b_{66}\varphi_{6,k} - (b_{12} + b_{66})\lambda_n \varphi_{4,k}^2;$$

$$\frac{d\tau_{\psi\gamma,n,k}}{d\gamma} = -c_2\varphi_{3,k}^1 - 2\varphi_{2,k}^1 - b_{22}\varphi_{5,k} + (b_{12} + b_{66})\lambda_n \varphi_{3,k}^3 - b_{22}\varphi_{7,k} + b_{66}\lambda_n^2 u_{\psi,n,k};$$

$$\frac{du_{\gamma,n,k}}{d\gamma} = c_4\sigma_{\gamma,n,k} - c_2\varphi_{4,k}^2 + c_1\lambda_n u_{s,k} - c_2\varphi_{1,k}^3; \quad (8)$$

$$\frac{du_{s,n,k}}{d\gamma} = a_{55}\tau_{s\gamma,n,k} - \lambda_n u_{\gamma,n,k};$$

$$\frac{du_{\psi,n,k}}{d\gamma} = a_{44}\tau_{\psi\gamma,n,k} - \varphi_{3,k}^2 + \varphi_{2,k}^2, \quad (k = \overline{0, K}; n = \overline{0, N})$$

з граничними умовами

$$\gamma = \gamma_p: \quad \sigma_{\gamma,n,k} = q_{\gamma,n,k}; \quad \tau_{s\gamma,n,k} = 0; \quad \tau_{\psi\gamma,n,k} = 0;$$

$$\gamma = \gamma_q: \quad \sigma_{\gamma,n,k} = 0; \quad \tau_{s\gamma,n,k} = 0; \quad \tau_{\psi\gamma,n,k} = 0. \quad (9)$$

Для розв'язування отриманої одновірної крайової задачі (8, 9) застосовується стійкий чисельний метод дискретної ортогоналізації. Для

визначення значень доповняльних функцій в процесі інтегрування використовуються ряди Фур'є для функцій, заданих на дискретній множині точок.

Числові результати та їх аналіз.

На основі розглянутого підходу досліджено напружений стан порожнистих циліндрів під дією внутрішнього тиску $q = q_0 \sin(\pi s/l)$ ($q_0 = \text{const}$). Задачу розв'язано за таких вихідних даних: довжина циліндрів $l = 80$, товщина циліндрів $H = 4$; параметри поверхні відліку – $a=20$; $c=0$ (коло), $c=8$ (еліпс), $c=14,14$ (овал), $c=16$ (сплюснутий овал). Механічні параметри: коефіцієнт Пуассона $\nu = 0,3$, модуль Юнга $E=1$.

Результати розв'язку задачі подано в середньому перерізі по довжині $l = 40$ на рис. 2 для розподілу полів переміщень u_γ поверхні відліку та для розподілу полів напружень σ_ψ на внутрішній (рис. 3) та зовнішній (рис. 4) поверхні циліндра вздовж прямої в інтервалі $0 \leq \psi \leq \pi/2$.

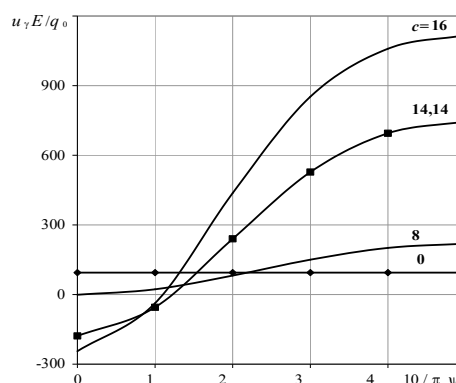


Рис. 2. Розподіл переміщень поверхні відліку вздовж прямої циліндра.

Відхилення форми поперечного перерізу від кругової призводить до збільшення жорсткості в перерізі $\psi = 0$ і зменшення в перерізі $\psi = \pi/2$. Чим більше поперечний переріз відрізняється від кругового, тим більш значної величини набувають переміщення в перерізі $\psi = \pi/2$. Так для $c=8$ переміщення збільшуються у 2,3 рази, для $c=14,14$ – у 7,9 рази і для $c=16$ – в 11,8 рази. При цьому, на відміну від циліндрів з еліптичним поперечним перерізом ($c=8$), для циліндрів з овальним поперечним перерізом ($c=14,14; 16$) в перерізі $\psi = 0$, переміщення змінюють знак на протилежний.

Розподіл напружень як на внутрішній, так і на зовнішній поверхні для циліндрів з некруговим поперечним перерізом носить

хвильовий характер. Своїх максимальних значень напруження досягають на проміжку $[3\pi/10; 2\pi/5]$.

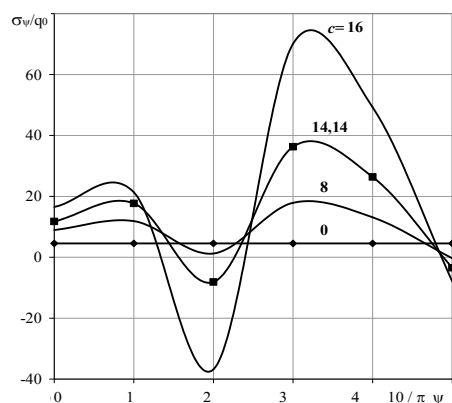


Рис. 3. Розподіл напружень вздовж напрямної циліндра на внутрішній поверхні.

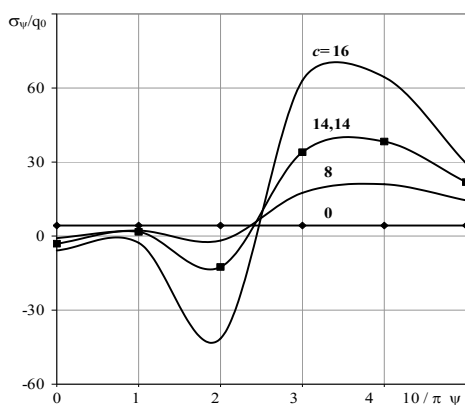


Рис. 4. Розподіл напружень вздовж напрямної циліндра на зовнішній поверхні.

При цьому, порівняно до кругового циліндра, їх значення збільшуються у 16; 8,2; 4 рази на внутрішній (рис. 3) та у 16,3; 9,8; 5,5 рази на зовнішній (рис. 4) поверхні циліндрів відповідно для $c=16; 14,14; 8$.

Висновки. В просторовій постановці розв'язано задачу та проведено аналіз напруженого стану порожнистих ізотропних циліндрів, що знаходяться під дією внутрішнього тиску в залежності від форми поперечного перерізу. Зокрема розглядалися циліндри з поперечним перерізом у вигляді еліпса та двох видів овалів. Було встановлено, що відхилення форми поперечного перерізу від кругової призводить до зміни жорсткості, що в свою чергу впливає на розподіл полів переміщень та

напружень. Отримані результати можуть бути використані при виборі поперечного перерізу циліндрів подібної форми.

Список використаних джерел

1. Kinde K.S. Buckling characteristic of multi-laminated composite elliptical cylindrical shells / K.S. Kinde, Ch. Kyoung-Sik // IJASE. – 2015. – 7. – P. 1 – 10.
2. Hatanaka K.S. Numerical investigations on shock oscillations ahead of a hemispherical shell in supersonic flow / K.S. Hatanaka, M. V. Rao, T. Saito, T. Mizukaki // Shock Waves. – 2016. – 26, № 3. – P. 299 – 310.
3. Влайков Г.Г. Некоторые задачи теории упругости для анизотропных цилиндров с некруговым поперечным сечением / Г.Г. Влайков, А.Я. Григоренко, С.Н. Шевченко – К.: Ин-т механики им. С.П. Тимошенко НАН Украины, Тех. центр НАН Украины, 2001. – 147 с.
4. Савелов А.А. Плоские кривые. Систематика, свойства, применение. (Справочное руководство) / А.А. Савелов – М.: ФИЗМАТЛИТ, 1960. – 292 с.
5. Grigorenko Ya.M. Applying Discrete Fourier Series to Solve Problems of the Stress State of Hollow Noncircular Cylinders / Ya.M. Grigorenko, L.S. Rozhok // Int. App. Mech. – 2014. – 50, № 2. – P. 105 – 127.

References

1. KINDE K. Buckling characteristic of multi-laminated composite elliptical cylindrical shells (2015) IJASE. (7). p. 1 – 10.
2. HATANAKA K. Numerical investigations on shock oscillations ahead of a hemispherical shell in supersonic flow (2016) Shock Waves. 26. (3). p. 299 – 310.
3. VLAYKOV G. Some problems of the theory of elasticity for anisotropic cylinders with non-circular cross section (2001) Inst. of Mechanics. S.P. Tymoshenko of NAS of Ukraine, Tech. Center of NAS of Ukraine.
4. SAVELOV A. Plane curves. Systematization, properties, application. (Reference Guide). (1960). M.: PHISMATHLIT.
5. GRIGORENKO Ya. Applying Discrete Fourier Series to Solve Problems of the Stress State of Hollow Noncircular Cylinders (2014) Int. App. Mech. 50(2). p. 105 – 127.

Надійшла до редколегії 16.12.2016

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 517.9

Н. Алієв, д.мат.н., проф.
Н. Ібрагімов, д.мат.н., проф.
Ш. Ніфтуллаєва, докторант

**Дослідження крайової задачі для
рівняння складеного типу з граничною
умовою, що включає нелокальні та
глобальні вирази**

Ленкаранський державний університет,
просп. Генерала Х. Асланова 50, м. Ленкарань,
Az4200, Азербайджанська Республіка
e-mail: natiq_ibrahimov@mail.ru,
sebineniftullayeva_90@mail.ru

N. Aliyev, Dr.Math.Sci., prof.
N. Ibrahimov, Dr.Math.Sci., prof.
Sh. Niftullayeva, doctoral student

**Investigation of the boundary problem for the
composite type equation with boundary
condition involving non-local and global terms**

Lenkaran State University,
General H. Aslanov ave., 50, Lenkaran,
Az4200, Azerbaijan Republic
e-mail: natiq_ibrahimov@mail.ru
sebineniftullayeva_90@mail.ru

У роботі досліджується крайова задача для рівнянь третього порядку з комплексними коефіцієнтами з нелокальними граничними умовами. Для отримання необхідних умов існування розв'язків використовуються фундаментальні розв'язки для рівнянь Коші-Рімана.

Ключові слова: Рівняння Коші-Рімана, рівняння складеного типу, нелокальні та глобальні умови, фундаментальне рішення, необхідні умови

The boundary value problem for the third order equations with complex coefficients with nonlocal boundary conditions is investigated in the paper. To obtain the necessary conditions for the existence of solutions, fundamental solutions are used for the Cauchy-Riemann equations.

Key Words: Cauchy-Riemann equation, composite type equation, non-local and global terms, fundamental solution, necessary condition

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

I. INTRODUCTION

It is known that for the first order elliptic Cauchy-Riemann equation the boundary problems with non-local conditions are studied by various authors [1-3].

Boundary problems for the mixed type equations (being both elliptic and hyperbolic in each point of the domain) were considered in [4]-[6] and composite type equations in [7]-[9].

As the starting works we can note the ones which considered the problems for the partial derivative equations with local boundary conditions [10]-[13].

Here we first give the fundamental solutions of the considered equation and then using them get the main relations. We identify the necessary conditions from the main relation and are remove

their singularities by the help of the boundary conditions. The obtained regular expressions allow us to derive the sufficient conditions for the Fredholm property of the considered problem.

Note that the boundary conditions here involve non-local (the agreement condition for the values of the function and its derivatives in the different points of the boundary) and global (the integrals of the given function and its derivatives over the boundary and in the given domain) terms.

II. PROBLEM STATEMENT

Consider the following boundary problem for the composite type third order equation

$$\frac{\partial^3 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2^2} + i \frac{\partial^3 u(x)}{\partial x_1^2 \partial x_2} = f(x), \quad x = (x_1, x_2) \in D \subset \mathbb{R}^2, \quad (1)$$

with the following three not linearly dependent boundary conditions

$$\begin{aligned} & \sum_{s=1}^2 \left[\alpha_k^{(s)}(x_1) \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} + \alpha_{k,1}^{(s)}(x_1) \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} + \right. \\ & \left. + \alpha_{k,2}^{(s)}(x_1) \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} + \alpha_{k,0}^{(s)}(x_1) u(x) \right] \Big|_{x_2=\gamma_s(x_1)} + \\ & + \sum_{s=1}^2 \int_{a_1}^{b_1} \left[\beta_k^{(s)}(x, t) \frac{\partial^2 u(t, y_2)}{\partial t_1 \partial y_2} + \beta_{k,1}^{(s)}(x_1, t) \frac{\partial u(t, y_2)}{\partial t} + \right. \\ & \left. + \beta_{k,2}^{(s)}(x_1, t) \frac{\partial u(t, y_2)}{\partial y_2} + \beta_{k,0}^{(s)}(x_1, t) u(t, y_2) \right] \Big|_{y_2=\gamma_s(t)} dt + \\ & + \int_D \left[K(x_1, y) \frac{\partial^2 u(y)}{\partial y_1 \partial y_2} + K_1(x_1, y) \frac{\partial u(y)}{\partial y_1} + \right. \\ & \left. + K_2(x_1, y) \frac{\partial u(y)}{\partial y_2} + K_0(x_1, y) u(y) \right] dy = \alpha_k(x_1), \\ & k = \overline{1, 3}; \quad x_1 \in [a_1, b_1]. \end{aligned} \quad (2)$$

Here D is a domain that is convex in the direction x_2 , the boundary $\Gamma = \partial D$ is a Lyapunov curve. The data of condition (2) (coefficients, kernels of the integrals and right hand sides) and right hand side of (1) the function $f(x)$ is a continuous function, $i = \sqrt{-1}$ imaginary unit.

Note that (2) is a general boundary condition, since all the boundary conditions can be obtained from the non-local ones. We note that setting of the non-local conditions avoids the disagreements (the number of the conditions) between ordinary and partial differential equations.

III. FUNDAMENTAL SOLUTION

It is known that the fundamental solution of the Cauchy-Riemann equation is of the form [14]

$$U_0(x - \xi) = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{1}{x_2 - \xi_2 + i(x_1 - \xi_1)}. \quad (3)$$

So,

$$\frac{\partial U_0(x - \xi)}{\partial x_2} + i \frac{\partial U_0(x - \xi)}{\partial x_1} = \delta(x - \xi), \quad (4)$$

where $\delta(x - \xi)$ is Dirac's delta function.

Denoting the fundamental solution of the considered equation (1) by $U(x - \xi)$ we get

$$\frac{\partial^3 U(x - \xi)}{\partial x_1 \partial x_2^2} + i \frac{\partial^3 U(x - \xi)}{\partial x_1^2 \partial x_2} = \delta(x - \xi). \quad (5)$$

Rewrite this equation in the form

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_2} + i \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \frac{\partial^2 U(x - \xi)}{\partial x_1 \partial x_2} = \delta(x - \xi), \quad (6)$$

Then considering (3) and (4) we have

$$\frac{\partial^2 U(x - \xi)}{\partial x_1 \partial x_2} = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{1}{x_2 - \xi_2 + i(x_1 - \xi_1)}. \quad (7)$$

This gives

$$\frac{\partial U(x - \xi)}{\partial x_1} = \frac{1}{2\pi} \ln[x_2 - \xi_2 + i(x_1 - \xi_1)], \quad (8)$$

And finally for the fundamental solution of equation (1) we get

$$\begin{aligned} U(x - \xi) &= \frac{1}{2\pi i} [x_2 - \xi_2 + i(x_1 - \xi_1)] \times \\ &\times \{ \ln[x_2 - \xi_2 + i(x_1 - \xi_1)] - 1 \}. \end{aligned} \quad (9)$$

IV. MAIN RELATIONS

To get the first main relation we multiply both sides of equation (1) by fundamental solution (9) and then integrate on the domain D

$$\begin{aligned} & \int_D \frac{\partial^3 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2^2} U(x - \xi) dx + i \int_D \frac{\partial^3 u(x)}{\partial x_1^2 \partial x_2} U(x - \xi) dx = \\ & = \int_D f(x) U(x - \xi) dx. \end{aligned}$$

If to integrate by parts the left hand side, other words applying Gauss-Ostragradski formula [14] we have

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} U(x - \xi) \cos(\nu, x_2) dx - \\ & - \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x - \xi)}{\partial x_2} \cos(\nu, x_1) dx + \\ & + \int_{\Gamma} u(x) \frac{\partial^2 U(x - \xi)}{\partial x_1 \partial x_2} \cos(\nu, x_2) dx - \int_D u(x) \frac{\partial^3 U(x - \xi)}{\partial x_1 \partial x_2^2} dx + \\ & + i \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} U(x - \xi) \cos(\nu, x_1) dx - \\ & - i \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial U(x - \xi)}{\partial x_1} \cos(\nu, x_2) dx + \\ & + i \int_{\Gamma} u(x) \frac{\partial^2 U(x - \xi)}{\partial x_1 \partial x_2} \cos(\nu, x_1) dx - i \int_D u(x) \frac{\partial^3 U(x - \xi)}{\partial x_1^2 \partial x_2} dx = \\ & = \int_D f(x) U(x - \xi) dx, \end{aligned}$$

here ν is the exterior normal to the boundary Γ of the domain D .

Thus we get the first main relation below

$$\int_{\Gamma} \left\{ \left[\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} U(x-\xi) + u(x) \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} - \right. \right. \\ \left. \left. - i \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} \right] \cos(v, x_2) + \right. \\ \left. + \left[- \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} + i \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} U(x-\xi) + \right. \right. \\ \left. \left. + i u(x) \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} \right] \cos(v, x_1) \right\} dx - \\ - \int_D f(x) U(x-\xi) dx = \begin{cases} u(\xi), & \xi \in D, \\ \frac{1}{2} u(\xi), & \xi \in \Gamma. \end{cases} \quad (10)$$

The first part of this relation at $\xi \in D$ gives arbitrary solution of (1) in D , and the second part the first necessary condition at $\xi \in \Gamma$.

Now we derive the second main relation. For this purpose we multiply the both sides of (1) by the derivative (8) of the fundamental solution and then integrate on the domain D , then apply Gauss-Ostragradski formula. Similarly to (10) we get

$$\int_D \frac{\partial^3 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2^2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} dx + i \int_D \frac{\partial^3 u(x)}{\partial x_1^2 \partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} dx = \\ = \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} dx, \\ \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} \cos(v, x_2) dx - \\ - \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} \cos(v, x_2) dx + \\ + \int_D \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial^3 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2^2} dx + \\ + i \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} \cos(v, x_1) dx - \\ - i \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1^2} \cos(v, x_2) dx + \\ + i \int_D \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial^3 U(x-\xi)}{\partial x_1^2 \partial x_2} dx = \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} dx,$$

that gives the following second main relation

$$\int_{\Gamma} \left\{ - \left[\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} - \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} - \right. \right. \\ \left. \left. - i \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1^2} \right] \cos(v, x_2) - \right.$$

$$\left. - \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} \cos(v, x_1) \right\} dx + \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} dx = \\ = \begin{cases} \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_1}, & \xi \in D, \\ \frac{1}{2} \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_1}, & \xi \in \Gamma. \end{cases} \quad (11)$$

The second part of this relation gives the necessary condition at $\xi \in \Gamma$.

Here is the third main relation

$$\int_D \frac{\partial^3 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2^2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} dx + i \int_D \frac{\partial^3 u(x)}{\partial x_1^2 \partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} dx = \\ = \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} dx, \\ \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} \cos(v, x_2) dx - \\ - \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_2^2} \cos(v, x_1) dx \int_{\Gamma} + \\ + \int_D \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial^3 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2^2} dx + \\ + i \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} \cos(v, x_1) dx - \\ - i \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} \cos(v, x_1) dx + \\ + i \int_D \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial^3 U(x-\xi)}{\partial x_1^2 \partial x_2} dx = \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} dx, \\ \int_{\Gamma} \left\{ \left[\frac{\partial u(\xi)}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_2^2} - i \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} + \right. \right. \\ \left. \left. + i \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} \right] \cos(v, x_1) - \right. \\ \left. - \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} \cos(v, x_2) \right\} dx + \\ + \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} dx = \begin{cases} \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_2}, & \xi \in D, \\ \frac{1}{2} \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_2}, & \xi \in \Gamma. \end{cases} \quad (12)$$

And the final main relation is

$$\int_D \frac{\partial^3 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2^2} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} dx + i \int_D \frac{\partial^3 u(x)}{\partial x_1^2 \partial x_2} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} dx =$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_D f(x) \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} dx, \\
 &\int_{\Gamma} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} \cos(v, x_2) dx - \\
 &\quad - \int_D \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial^3 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2^2} dx + \\
 &\quad + i \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} \cos(v, x_1) dx - \\
 &\quad - i \int_D \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \frac{\partial^3 U(x-\xi)}{\partial x_1^2 \partial x_2} dx = \int_D f(x) \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} dx, \\
 &\int_{\Gamma} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} [\cos(v, x_2) + i \cos(v, x_1)] dx - \\
 &\quad - \int_D f(x) \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} dx = \begin{cases} \frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial \xi_1 \partial \xi_2}, & \xi \in D, \\ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial \xi_1 \partial \xi_2}, & \xi \in \Gamma. \end{cases} \quad (13)
 \end{aligned}$$

Note 1. Since the second derivatives of the sought function is not involved in the both local and non-local parts of the boundary condition (2) it may be seen that these derivatives are not needed for the main relations.

Note 2. Since the left hand side of obtained main relations (10)-(12) involves boundary values of the sought function, its derivatives with respect to x_1 and x_2 , and mixed derivatives obtaining of the main relation (13) was necessary.

Note 3. Since obtained relations (10)-(13) do not involve the boundary values of the $\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1^2}$ and

$\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_2^2}$ it was not necessary to obtain main relations for them.

Note 4. One could apply the integration by parts in the relations (10) and (12) by the such way that in spite of the involving of the second derivatives of the sought function in boundary condition (2) all the linearly independent expressions of the necessary conditions would had to be obtained.

Thus we get the following statement.

Theorem 1. If D is a convex in the direction x_2 domain, the boundary $\Gamma = \partial D$ is Lyapunov curve, $f(x)$ is a continuous function, then any solution of equation (1) defined in D satisfies main relations (10)-(13).

V. NECESSARY CONDITIONS

Let us identify the necessary condition in obtained main relations (10)-(13).

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} u(\xi_1, \gamma_1(\xi_1)) &= -\frac{1}{2\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{u(x_1, \gamma_1(x_1))}{\gamma_1(x_1) - \gamma_1(\xi_1) + i(x_1 - \xi_1)} \times \\
 &\quad \times [1 - \gamma_1'(x_1)] dx_1 + \dots, \\
 \frac{1}{2} u(\xi_1, \gamma_2(\xi_1)) &= -\frac{1}{2\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{u(x_1, \gamma_2(x_1))}{\gamma_2(x_1) - \gamma_2(\xi_1) + i(x_1 - \xi_1)} \times \\
 &\quad \times [1 - i\gamma_2'(x_1)] dx_1 + \dots,
 \end{aligned}$$

here the dots stands for the sum of the non-singular terms. Using the Lagrange's finite increment formula in these relations we obtain

$$\begin{cases} u(\xi_1, \gamma_1(\xi_1)) = \frac{i}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{u(x_1, \gamma_1(x_1))}{x_1 - \xi_1} dx_1 + \dots, \\ u(\xi_1, \gamma_2(\xi_1)) = -\frac{i}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{u(x_1, \gamma_2(x_1))}{x_1 - \xi_1} dx_1 + \dots. \end{cases} \quad (14)$$

Now we use (11). Since

$$\begin{aligned}
 &-\int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \left[\frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} + i \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1^2} \right] \cos(v, x_2) dx = \\
 &= -\int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \left[\frac{1}{2\pi} \cdot \frac{1}{x_2 - \xi_2 + i(x_1 - \xi_1)} + \right. \\
 &\quad \left. + i \cdot \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{1}{x_2 - \xi_2 + i(x_1 - \xi_1)} \right] \cos(v, x_2) dx = 0, \quad (15)
 \end{aligned}$$

Relation (11) does not contain the singular parts. By the same as we see way from (12), since

$$\begin{aligned}
 &\int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \left[\frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_2^2} + i \frac{\partial^2 U(x-\xi)}{\partial x_1 \partial x_2} \right] \cos(v, x_1) dx = \\
 &= \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \left[\frac{1}{2\pi i} \cdot \frac{1}{x_2 - \xi_2 + i(x_1 - \xi_1)} + \right. \\
 &\quad \left. + i \cdot \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{1}{x_2 - \xi_2 + i(x_1 - \xi_1)} \right] \cos(v, x_1) dx = 0, \quad (16)
 \end{aligned}$$

the necessary conditions in (12) also do not contain the singular terms.

Finally from (13) we obtain the following necessary conditions

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} \Big|_{\xi_2 = \gamma_1(\xi_1)} = \\
 &= -\frac{1}{2\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \Big|_{x_2 = \gamma_1(x_1)} \frac{1 - i\gamma_1'(x_1)}{\gamma_1(x_1) - \gamma_1(\xi_1) + i(x_1 - \xi_1)} dx_1 + \dots,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} \Big|_{\xi_2=\gamma_2(\xi_1)} = \\ & = \frac{1}{2\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \Big|_{x_2=\gamma_2(x_1)} \frac{1-i\gamma_2'(x_1)}{\gamma_2(x_1)-\gamma_2(\xi_1)+i(x_1-\xi_1)} dx_1 + \dots, \\ & \text{or} \\ & \left\{ \begin{aligned} \frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} \Big|_{\xi_2=\gamma_1(\xi_1)} &= \frac{i}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \Big|_{x_2=\gamma_1(x_1)} \frac{dx_1}{x_1-\xi_1} + \dots, \\ \frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} \Big|_{\xi_2=\gamma_2(\xi_1)} &= -\frac{i}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \Big|_{x_2=\gamma_2(x_1)} \frac{dx_1}{x_1-\xi_1} + \dots \end{aligned} \right. \quad (17) \end{aligned}$$

Thus we get

Theorem 2. Under the conditions of Theorem 1 any solution of equation (1) in D satisfies (14) and (17), and also regular necessary conditions for $\frac{\partial u(x)}{\partial \xi_k}$, $k=1, 2$.

Note 5. Since only two necessary conditions (14) and (17) obtained from the main relations involve singularities, consider the following linear combination

$$\begin{aligned} & \alpha_k^{(1)}(\xi_1) \frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} \Big|_{\xi_2=\gamma_1(\xi_1)} - \alpha_k^{(2)}(\xi_1) \frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} \Big|_{\xi_2=\gamma_2(\xi_1)} + \\ & + \alpha_{k,0}^{(1)}(\xi_1) u(\xi_1, \gamma_1(\xi_1)) - \alpha_{k,0}^{(2)}(\xi_1) u(\xi_1, \gamma_2(\xi_1)) = \\ & = \frac{i}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \left[\alpha_k^{(1)}(\xi_1) \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \Big|_{x_2=\gamma_1(x_1)} + \alpha_k^{(2)}(\xi_1) \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \Big|_{x_2=\gamma_2(x_1)} + \right. \\ & \left. + \alpha_{k,0}^{(1)}(\xi_1) u(x_1, \gamma_1(x_1)) + \alpha_{k,0}^{(2)}(\xi_1) u(x_1, \gamma_2(x_1)) \right] \frac{dx_1}{x_1-\xi_1} + \dots = \\ & = \frac{i}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \left\{ \alpha_k(x_1) - \sum_{s=1}^2 \left[\alpha_{k,1}^{(s)}(x_1) \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} + \alpha_{k,2}^{(s)}(x_1) \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \right] \Big|_{x_2=\gamma_s(x_1)} - \right. \\ & \left. - \sum_{s=1}^2 \int_{a_1}^{b_1} \left[\beta_k^{(s)}(x_1, t) \frac{\partial^2 u(t, y_2)}{\partial t \partial y_2} + \beta_{k,1}^{(s)}(x_1, t) \frac{\partial u(t, y_2)}{\partial t} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \beta_{k,2}^{(s)}(x_1, t) \frac{\partial u(t, y_2)}{\partial y_2} + \beta_{k,0}^{(s)}(x_1, t) u(t, y_2) \right] \Big|_{y_2=\gamma_s(t)} dt - \right. \\ & \left. - \int_D \left[K(x_1, y) \frac{\partial^2 u(y)}{\partial y_1 \partial y_2} + K_1(x_1, y) \frac{\partial u(y)}{\partial y_1} + K_2(x_1, y) \frac{\partial u(y)}{\partial y_2} + \right. \right. \\ & \left. \left. + K_0(x_1, y) u(y) \right] dy \right\} \frac{dx_1}{x_1-\xi_1} + \dots, \quad k=\overline{1,3}. \quad (18) \end{aligned}$$

Note that to obtain (18) we used boundary conditions (2). Here we wrote only singular terms.

Note 6. In relation (18) by changing the integration turn in all terms, excepting the first three ones, one can make them regular (the unknown function passes to the first integral and in the internal integral there is no any unknown function).

Now let us consider the first term in (18). Since it does not contain singularity we can integrate it by parts

$$\begin{aligned} & \int_{a_1}^{b_1} \frac{\alpha_k(x_1)}{x_1-\xi_1} dx_1 = \alpha_k(x_1) \ln|x_1-\xi_1| \Big|_{x_1=a_1}^{x_1=b_1} - \\ & - \int_{a_1}^{b_1} \alpha_k'(x_1) \ln|x_1-\xi_1| dx. \end{aligned} \quad (19)$$

If

$\alpha_k(x_1) \in C^{(1)}[a_1, b_1]$, $\alpha_k(a_1) = \alpha_k(b_1) = 0$, $k=\overline{1,3}$; (20) then integral (19) exists in this sense.

Finally, let's explain the regularization of the second and third terms at the right hand side of (18). Considering (15) and (16) we can see the regularity of the necessary conditions obtained from main relations (11) and (12). So, the relations obtained from (11) and (12) for the boundary values of $\frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_1}$ and $\frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_2}$ are regular. Putting those relations into (18) and changing the integration turn one can make them regular as above.

Thus we get

Theorem 3. Under the conditions of Theorem 2 if the coefficients $\alpha_k^{(s)}(x_1), \alpha_{k,0}^{(s)}(x_1)$, $k=\overline{1,3}; s=\overline{1,2}$ of boundary condition (2) are from Holder class; the functions $\alpha_{kj}^{(s)}(x_1)$, $k=\overline{1,3}, j=\overline{1,2}, s=\overline{1,2}$, $\beta_k^{(s)}(x_1, t)$, $\beta_{kj}^{(s)}(x_1, t)$, $k=\overline{1,3}, j=\overline{0,2}, s=\overline{1,2}$, and $K(x_1, y)$, $K_j(x_1, y)$, $j=\overline{0,2}$ are continuous; condition (20) is fulfilled, then the solution of equation (1) in the domain D satisfies regular relations (18).

VI. FREDHOLM PROPERTY

First we return to conditions (11) and (12) and identify the necessary conditions there

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_1} = - \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} [\cos(\nu, x_2) + \\ & + i \cos(\nu, x_1)] dx + \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_1} dx, \quad \xi \in \Gamma, \end{aligned}$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_2} = - \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdot \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} [\cos(\nu, x_2) + i \cos(\nu, x_1)] dx + \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} dx, \quad \xi \in \Gamma. \quad (21)$$

To obtain (21) we considered relations (15) and (16). Now we differentiate (9) and get

$$\frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_2} = \frac{1}{2\pi i} \ln[x_2 - \xi_2 + i(x_1 - \xi_1)]. \quad (22)$$

This relation together with (8) and (21) gives

$$\frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_1} \bigg|_{\xi_2=\gamma_k(\xi_1)} = i \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_2} \bigg|_{\xi_2=\gamma_k(\xi_1)}, \quad k=1, 2, \quad (23)$$

Now we consider the following system of 6 algebraic equations with 6 variables obtained from boundary condition (2) and regular relations (18) using (23)

$$\left\{ \begin{aligned} & \alpha_j^{(1)}(x_1) \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \bigg|_{x_2=\gamma_1(x_1)} + \alpha_j^{(2)}(x_1) \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \bigg|_{x_2=\gamma_2(x_1)} + \\ & + [i\alpha_{j1}^{(1)}(x_1) + \alpha_{j2}^{(1)}(x_1)] \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \bigg|_{x_2=\gamma_1(x_1)} + [i\alpha_{j1}^{(2)}(x_1) + \alpha_{j2}^{(2)}(x_1)] \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \bigg|_{x_2=\gamma_2(x_1)} + \\ & + \alpha_{j0}^{(1)}(x_1) u(x_1, \gamma_1(x_1)) + \alpha_{j0}^{(1)}(x_1) u(x_1, \gamma_2(x_1)) = \dots, \quad j = \overline{1, 3}, \\ & \alpha_j^{(1)}(x_1) \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \bigg|_{x_2=\gamma_1(x_1)} + \alpha_j^{(2)}(x_1) \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \bigg|_{x_2=\gamma_2(x_1)} + \\ & + \alpha_{j0}^{(1)}(x_1) u(x_1, \gamma_1(x_1)) - \alpha_{j0}^{(1)}(x_1) u(x_1, \gamma_2(x_1)) = \dots, \quad j = \overline{1, 3}. \end{aligned} \right. \quad (24)$$

If denote

$$\Delta(x_1) = \begin{vmatrix} \alpha_1^{(1)}(x_1) & \alpha_1^{(2)}(x_1) & i\alpha_{11}^{(1)}(x_1) + \alpha_{12}^{(1)}(x_1) & i\alpha_{11}^{(2)}(x_1) + \alpha_{12}^{(2)}(x_1) & \alpha_{10}^{(1)}(x_1) & \alpha_{10}^{(2)}(x_1) \\ \alpha_2^{(1)}(x_1) & \alpha_2^{(2)}(x_1) & i\alpha_{21}^{(1)}(x_1) + \alpha_{22}^{(1)}(x_1) & i\alpha_{21}^{(2)}(x_1) + \alpha_{22}^{(2)}(x_1) & \alpha_{20}^{(1)}(x_1) & \alpha_{20}^{(2)}(x_1) \\ \alpha_3^{(1)}(x_1) & \alpha_3^{(2)}(x_1) & i\alpha_{31}^{(1)}(x_1) + \alpha_{32}^{(1)}(x_1) & i\alpha_{31}^{(2)}(x_1) + \alpha_{32}^{(2)}(x_1) & \alpha_{30}^{(1)}(x_1) & \alpha_{30}^{(2)}(x_1) \\ \alpha_1^{(1)}(x_1) & -\alpha_1^{(2)}(x_1) & 0 & 0 & \alpha_{10}^{(1)}(x_1) & -\alpha_{10}^{(2)}(x_1) \\ \alpha_2^{(1)}(x_1) & -\alpha_2^{(2)}(x_1) & 0 & 0 & \alpha_{20}^{(1)}(x_1) & -\alpha_{20}^{(2)}(x_1) \\ \alpha_3^{(1)}(x_1) & -\alpha_3^{(2)}(x_1) & 0 & 0 & \alpha_{30}^{(1)}(x_1) & -\alpha_{30}^{(2)}(x_1) \end{vmatrix} \neq 0, \quad (25)$$

then from system (24) the functions

$$u(x_1, \gamma_1(x_1)), u(x_1, \gamma_2(x_1)), \quad (26)$$

can be uniquely defined by the Cramer's method. These relations indeed are normal, second kind Fredholm integral system with respect to functions (26) with a kernel without singularities.

Note 7. It is easy to see that functions (26) defined from system (24) will depend on the integrals of those functions (considering (23)) and integrals of the functions $u(x)$, $\frac{\partial u(x)}{\partial x_1}$, $\frac{\partial u(x)}{\partial x_2}$, $\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_1 \partial x_2}$ on the domain D .

Note 8. The equations for the above functions are taken from the first relations in main relations (10)-(13).

Thus we get the following theorem.

Theorem 4. Under the conditions of theorem 3 if condition (25) is satisfied then problem (1) - (2) for composite type equation (1) with general linear boundary condition (2) containing non-local and global terms is of Fredholm property.

IV. CONCLUSION

In this paper, boundary-value problems for linear equations with partial derivatives of the third order with complex coefficients were investigated. Received integral representations of solutions under non-local boundary conditions.

Список використаних джерел

1. Aliev N.A. Investigation of the solution of the boundary value problem for the Cauchy-Riemann equation on a plane domain/ Aliev N.A., Mekhtiev A.A. // Scientific News of Sumgait State University. – 2002. – Vol.2, No.4. – P. 30-34 .
2. Aliev N.A. On a Fredholm property of the boundary value problems for the Cauchy-Riemann equation on the sharp angle / Aliev N.A., Bagirov G.A., Velieva Z.T. // Journal of Contemporary Applied Mathematics. – 2011. – V.1, No.2. – P.48.
3. Aliev N.A. Steklov problem for the first order elliptic equation/ Aliev N.A., Zeynalov R.M. // News of Baku University. – 2012. – No.2. – P.13-20.
4. Aliyev N. Sufficient conditions for the reduction of the BVP including a mixed PDE with non-local boundary conditions to Fredholm integral equations / Aliyev N., Jahanshahi M. // International Journal of Mathematical Education in Science and Technology. – 1997. – 28, No.3. – P.419-425.
5. Akhmedov R.G. Investigation of the solutions of nonlocal boundary value problems for a disjointed type equation/ Akhmedov R.G., Aliev N.A. // International conference “Modern problems of computational mathematics and mathematical physics”, Moscow. – 2009. – P.136.
6. Aliev N.A. The problem of the mixed type first-order model equation/ Aliev N.A., Mamedov F.O. // Izv. AN Azerb. SSR. – 1983. – No.6. – P.110-113.
7. Gharahgheshlaghi A.D. On a Fredholm property of the boundary value problems for the composite type model with general boundary conditions/ Gharahgheshlaghi A.D., Aliyev N. // International Journal of Computer Mathematics, Taylor & Francis. – 2011. – P.124-135.
8. Aliev N.A. Investigation of solutions of boundary value problems for a composite type equation with non-local boundary conditions / Aliev N.A., Aliev A.M. // arxiv:0807, 1697, Vol.1, [math.AP] 10 Jul 2008, pp.1-6.
9. Aliev N.A. On a Fredholm property of the boundary problem / Aliev N.A. Bagirov G.A., Garaeva N.I. // Journal of Contemporary Applied Mathematics. – 2012. – Vol.2, No.1. – P.20-26.

References

1. ALIEV N.A., MEKHTIEV A.A. (2002) Investigation of the solution of the boundary value problem for the Cauchy-Riemann equation on a plane domain, *Scientific News of Sumgait State University*, Vol.2, No.4. – P. 30-34 .
2. ALIEV N.A., BAGIROV G.A., VELIEVA Z.T. (2011) On a Fredholm property of the boundary value problems for the Cauchy-Riemann equation on the sharp angle, *Journal of Contemporary Applied Mathematics*, v.1, No.2. – P.48.
3. ALIEV N.A., ZEYNALOV R.M. (2012) Steklov problem for the first order elliptic equation, *News of Baku University*, No.2. – P.13-20.
4. ALIYEV N., JAHANSHAH M. (1997) Sufficient conditions for the reduction of the BVP including a mixed PDE with non-local boundary conditions to Fredholm integral equations, *International Journal of Mathematical Education in Science and Technology*, 28, No.3. – P.419-425.
5. AKHMEDOV R.G., ALIEV N.A. (2009) Investigation of the solutions of nonlocal boundary value problems for a disjointed type equation, *International conference “Modern problems of computational mathematics and mathematical physics”*, Moscow. – P.136.
6. ALIEV N.A., MAMEDOV F.O. (1983) The problem of the mixed type first-order model equation, *Izv. AN Azerb. SSR*, No.6. – P.110-113.
7. GHARAHGHESHLAGHI A.D., ALIYEV N. (2011) On a Fredholm property of the boundary value problems for the composite type model with general boundary conditions, *International Journal of Computer Mathematics*, Taylor & Francis. – P.124-135.
8. ALIEV N.A., ALIEV A.M. (2008) Investigation of solutions of boundary value problems for a composite type equation with non-local boundary conditions, arxiv:0807, 1697, Vol.1, [math.AP] 10 Jul 2008, pp.1-6.
9. ALIEV N.A. BAGIROV G.A., GARAEVA N.I. (2012) On a Fredholm property of the boundary problem, *Journal of Contemporary Applied Mathematics*, vol.2, No.1. – P.20-26.

10. Bitsadze A.V. On the collisions of a biased-composite type / Bitsadze A.V. // *Proceedings of the All-Union Symposium on Mathematics and Mechanics*. Novosibirsk, 1960. – P. 163-167.
11. Bitsadze A.V. On the equations of mixed-composite type, In collection, "Some Problems of Mathematics and Mechanics (to the Honesty of Academician MA Lavrent'ev)" / Bitsadze A.V. // *Izd-vo AN SSSR*, Novosibirsk, 1961. – P. 82-89.
12. Dzhuraev T.D. On some boundary-value problems for the equation of the mixed-composite type / Dzhuraev T.D. // *Siberian Mathematical Journal*. – 1963. – Vol.IV, No.4. – P.67-72.
13. Salakhitdinov M.S. Some boundary-value problems for the equation of the mixed-composite type / Salakhitdinov M.S. // *Trudy Tashkent State University*.
14. Vladimirov V.S. *Equations of Mathematical Physics*/ Vladimirov V.S. – Moscow, Nauka, 1981. – 512 p.
10. BITSADZE A.V. (1960) On the collisions of a biased-composite type, *Proceedings of the All-Union Symposium on Mathematics and Mechanics*, Novosibirsk. – P. 163-167.
11. BITSADZE A.V. (1961) On the equations of mixed-composite type, In collection, "Some Problems of Mathematics and Mechanics (to the Honesty of Academician MA Lavrent'ev)", *Izd-vo AN SSSR*, Novosibirsk. – P. 82-89.
12. DZHURAEV T.D. (1963) On some boundary-value problems for the equation of the mixed-composite type, *Siberian Mathematical Journal*, vol.IV, No.4. – P.67-72.
13. SALAKHITDINOV M.S. Some boundary-value problems for the equation of the mixed-composite type, *Trudy Tashkent State University*.
14. VLADIMIROV V.S. (1981) *Equations of Mathematical Physics*, Moscow, Nauka.

Надійшла до редколегії 01.02.2017

УДК 004.912

Бармак О.В.¹, д.т.н., проф.
Крак Ю.В.², д.ф.-м.н., проф.
Багрій Р.О.¹ ст. викл.

O.V.Barmak¹, Dr Sci. in Tech., prof.
Yu.V.Krak², Dr Sci. in Math., prof.
Bagriy R.O.¹ senior lecturer

Моделювання системи прогнозування тексту

Modeling the text prediction system

¹ Хмельницький національний університет,
29000, м. Хмельницький, вул. Інститутська, 11,
e-mail: gcardinal2009@gmail.com

² Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03127, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4д,
e-mail: krak@univ.kiev.ua

¹ Khmelnytskyi National University, 29000,
Khmelnytskyi, Instytutska str., 11,
e-mail: gcardinal2009@gmail.com

² Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03127, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: krak@univ.kiev.ua

У роботі проведено дослідження інтелектуалізації введення інформації за допомогою системи прискореного введення тексту в цифрові пристрої з метою побудови моделі корпусу розмовної української мови та системи набору тексту, яка базується на цій моделі. Така система використовує меншу кількість команд для введення букв та прогнозує варіанти слів, базуючись на даних корпусу слів та словосполучень для спілкування. Описано принцип збору текстів, що містять такі діалоги та порядок дій для формування навчального корпусу слів. Детально описано статистичну модель мови, яку пропонується застосовувати для прогнозування слів. Для оцінки ймовірностей використано модель Katz's backoff, що "відступає" до N-грам меншого порядку у випадку, коли використання більш високого порядку неможливе. Для побудованого корпусу слів експериментально показана достатньо висока якість прогнозування наступних слів речення при введенні тексту за допомогою 4-х клавіш-команд.

Ключові слова: альтернативна комунікація, формування корпусу слів, N-грами, прогнозування.

This paper investigates the intellectualization of text input using a system for accelerated input of texts into digital devices with a view to constructing a model of a corpus of the Ukrainian spoken language and a text typing system based on this model. Such a system uses a smaller number of commands to input letters and predicts variants of words on the basis of the corpus of words and word combinations for communication. The described procedure for collecting texts containing such dialogues and order of actions for the formation of the educational corpus of words. The described in detail a statistical language model, which is proposed to be applied to the prediction of words. To estimate the probability used Katz's backoff model, that "backoff" to the N-gram of lower order, when use of higher order impossible. For the constructed corpus of words is shown experimentally a rather high quality of predicting the following words of the sentence when entering text with using of four commands keys.

Keywords: alternative communication, formation of a corpus of words, N-grams, prediction.

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

ВСТУП

Концепція додаткової та альтернативної комунікації (Augmentative and Alternative Communication – AAC) [1] полягає в наданні людям з обмеженими можливостями спілкування засобів для комунікації із зовнішнім світом. Основна проблема будь-якого засобу AAC

полягає в малій кількості доступних керуючих сигналів, які необхідно зв'язати з великим набором символів комунікації.

В сучасних умовах розвитку ІТ-пристроїв спостерігається тенденція їх мінімізації за розмірами, включаючи перспективні розробки пристроїв-чипів, що можуть бути імплантованими у тіло людини. Виходячи з цього стає можливим

застосування цих пристроїв не тільки у стаціонарних умовах, а й при переміщеннях. Використання таких пристроїв людьми з обмеженими можливостями спілкування дозволяє реалізувати для них альтернативну комунікацію, яка не буде прив'язана до якогось певного місця.

Альтернативна комунікація передбачає підходи, методи та технології для перетворення даних, отриманих за допомогою ААС пристроїв в повноцінну інформацію. Таке перетворення пропонується реалізувати шляхом організації введення тексту меншою кількістю комунікаційних одиниць та створення програмного забезпечення для надання можливості спілкування.

Авторами запропоновано інформаційну технологію альтернативної комунікації [2], апаратно-програмна реалізація якої повинна забезпечити комунікацію максимально можливими способами. Важливою частиною запропонованої інформаційної технології є інтелектуалізація введення інформації.

Постановка задачі. Оптимізувати продуктивність введення текстових повідомлень шляхом зведення до мінімуму взаємодії з користувачем для вибраного виду комунікації. Дослідити інтелектуалізацію введення інформації за допомогою системи прогнозування, що автоматично пропонує наступні слова, які найбільш часто зустрічаються після вже введених слів у реченні.

МОДЕЛЮВАННЯ СИСТЕМИ ПРОГНОЗУВАННЯ ТЕКСТУ ДЛЯ СПІЛКУВАННЯ

Алгоритми прогнозування здатні автоматично завершувати введення тексту, що дозволяє оптимізувати час введення. Для прогнозування потрібно знайти баланс між швидкістю введення і функціональністю. Чим більший словник і чим більше технологій введення використовується, тим повільніше стає час відгуку, але підвищується якість результатів.

Для дослідження і моделювання системи прогнозування тексту для спілкування пропонується наступний підхід:

- 1) формування множини (корпусу) слів (словосполучень) української мови, обмеженого словами для повсякденного спілкування;
- 2) застосування статистичної моделі мови для прогнозування наступних слів в словосполученні.

Для формування корпусу слів пропонується експертний підхід, який дозволив би за джерелами з контенту україномовних сайтів, періодичної преси, словників-розмовників тощо, підібрати слова та словосполучення, що використовуються в повсякденному спілкуванні. Для оцінки ймовірностей наступних слів у словосполученні, за цим корпусом, пропонується застосувати одну з статистичних моделей мови.

Для системи прогнозування тексту необхідно сформувати навчальний корпус адаптований до потрібного виду комунікації. Вибір навчального корпусу відіграє важливу роль в розробці будь-якої системи прогнозування тексту. Статистичні мовні моделі необхідно навчати за великим набором текстів для отримання достовірних оцінок ймовірності. Також, чим більше навчальний корпус схожий на даний вид комунікації, тим більш точними будуть оцінки ймовірності.

Для вирішення цієї задачі запропоновано використати діалоги на побутові теми, що використовуються в словниках-розмовниках для вивчення іноземних мов. Такі діалоги моделюють розмови між людьми, які бачать один одного, охоплюють найбільш можливі побутові ситуації та використовують обмежений набір слів і фраз. Для системи комунікації людей з обмеженими можливостями подібні властивості діалогу підходять як не можна краще.

Для побудови статистичної моделі мови необхідно обробити отриманий набір текстів. На сьогоднішній день існує безліч способів розбиття електронного тексту на окремо значущі одиниці для подальшої комп'ютерної обробки цих одиниць. Для обробки отриманого набору текстів пропонується застосувати алгоритми обробки природної мови (Natural Language Processing, NLP) [3].

Для задач прогнозування тексту застосовуються статистичні моделі мови. В області комунікації ААС для прогнозування послідовності слів частіше всього використовується N-грамна модель. За допомогою інструментарію text2ngram [4], із підготовленого списку речень, можна згенерувати N-грами у вигляді таблиць бази даних.

Метою побудови N-грам моделей є визначення ймовірності використання заданого слова чи фрази (словосполучення). Найбільш часто використовуються N-грамні моделі де N дорівнює 2 або 3 (біграми і триграми). Юніграми є виродженим випадком, коли припускається, що

ймовірність кожного слова повністю незалежна від минулої історії. Чим більше N , тим краще точність прогнозування, але і тим більше використовується системних ресурсів.

N -грамні моделі визначають ймовірності використання заданої фрази (словосполучення), формально, як ймовірність виникнення послідовності слів у деякому корпусі (наборі текстів). Для оцінки цих ймовірностей запропоновано використати статистичну модель мови Katz's backoff [3], що базується на корпусі слів.

Основною ідеєю Katz's backoff моделі є оцінка умовної ймовірності слова шляхом «відступу» до n -грам меншого порядку у випадку, коли n -грама більш високого порядку не знайдена у навчальному корпусі. Таким чином, модель з самою повною інформацією використовується для забезпечення найкращих результатів.

Зокрема, для найвищого порядку пропонується використати триграмну модель, і відступи виконувати рекурсивно до біграм та юніграм. Формула для триграм моделі має наступний вигляд:

$$P_{BO}(w_n | w_{n-2}, w_{n-1}) = \begin{cases} P^*(w_n | w_{n-2}, w_{n-1}), & \text{якщо } C(w_{n-2}, w_{n-1}, w_n) > 0 \\ \alpha(w_{n-2}, w_{n-1}) P_{BO}(w_n | w_{n-1}), & \text{якщо } C(w_{n-2}, w_{n-1}) > 0 \\ P_{BO}(w_n | w_{n-1}), & \text{інакше} \end{cases} \quad (1)$$

де:

$$P_{BO}(w_n | w_{n-1}) = \begin{cases} P^*(w_n | w_{n-1}) & \text{якщо } C(w_{n-1}, w_n) > 0 \\ \alpha(w_{n-1}) P^*(w_n) & \text{інакше} \end{cases} \quad (2)$$

$$P^*(w_n | w_{n-2}, w_{n-1}) = \frac{C^*(w_{n-2}, w_{n-1}, w_n)}{C(w_{n-2}, w_{n-1})} \quad (3)$$

Де P^* згладжена ймовірність, обчислена за оцінкою Good-Turing [3] і α – коефіцієнти відступу. Коефіцієнт α пропонується прийняти рівним 0.4, як такий, що застосовується в моделі Stupid backoff [5] та показує наближену до інших методів якість прогнозування та спрощує обчислення.

Ймовірність слів, що прогножуються, обчислюються як оцінка моделі мови для поточного контексту. Якщо речення, що

вводиться складається з трьох або більше слів, для прогнозування використовується модель для триграм. Для розрахунку триграм-ймовірності використовуються два попередніх слова. Наприклад, для фрази "у мене болить" ймовірність для останнього слова буде записана як $P(\text{болить} | \text{у мене})$.

Для словосполучення з двох слів або у випадку, коли словосполучення не знайдено серед триграм, використовується відповідна модель для біграм. У цьому випадку для розрахунку ймовірності береться тільки попереднє слово – $P(\text{болить} | \text{мене})$.

Модель юніграм використовується у випадку, коли прогнозоване слово є першим в реченні (тобто відсутні попередні слова) або словосполучення не знайдено серед біграм або триграм. Ймовірність слова буде дорівнювати його нормалізованій частоті – $P(\text{болить})$.

Для покращення процесу введення тексту необхідно, щоб якомога більше слів, що вводяться, прогнозувалися як слова "за замовчуванням", тобто відповідали вимогам користувача. Тоді це не потребуватиме додаткових дій від нього. Якщо потрібне слово знаходиться нижче в списку прогнозованих слів, то його вибір вимагає одну додаткову дію за кожною позицією у списку.

Для визначення якості прогнозування було проведено ряд експериментів для кожної з моделей. На момент проведення тестування приблизна кількість типів юніграм дорівнювала 15000, біграм – 65000, триграм – 93000.

Перше тестування полягало в прогнозуванні того ж тексту, на основі якого були сформовані N -грам моделі. Загальна кількість фраз для прогнозування склала понад 18000.

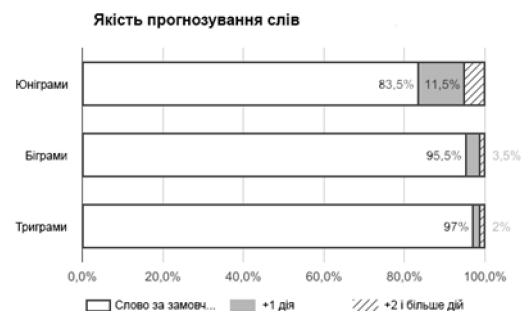


Рис. 1. Прогнозування слів за різними моделями

Юніграм модель показала низьку якість прогнозування – 83,5% (рис. 1). Для інших випадків необхідно було застосовувати одну

додаткову дію для вибору слова, а іноді дві і більше таких дій. Для біграм моделі цей показник значно більше – 95.5%, триграмна модель ще трохи покращує прогнозування. Цього цілком достатньо для комфортної роботи.

Наступні тестування полягали в прогнозуванні довільного тексту. Обсяг тексту склав близько 3000 фраз з загальною кількістю понад 15000 слів. Для прогнозування використовувалася запропонована статистична модель мови, що "відступає" до N-грам меншого порядку у випадку, коли використання більш високого порядку неможливе. Якість прогнозування склала 89% слів, відомих N-грам моделей. Зниження точності прогнозування можна пояснити тим, що в довільному тексті завжди присутній певний відсоток нових типів біграм та триграм. Також, у разі відсутності слова в N-грам моделі, наступне за ним слово може бути прогнозовано тільки за юніграм моделлю.

ВИСНОВКИ

У роботі запропонована система прогнозування, що автоматично пропонує наступні слова, які найбільш часто зустрічаються після вже введених слів у реченні. Подана модель комунікації для повсякденного спілкування, що передбачає використання розмовних діалогів на побутові теми. Описаний принцип збору текстів, що містять такі діалоги та алгоритм дій для формування навчального корпусу слів. Детально описана статистична модель мови, що пропонується застосувати для прогнозування слів, що дозволить прогнозувати слова, які є в словнику, з ймовірністю 89% для довільного тексту.

Подальші дослідження спрямовані на реалізацію запропонованого способу альтернативного спілкування за допомогою стандартних гаджетів (планшети, телефони) з метою використання для організації діалогів з людьми, у яких тимчасово відсутній або ускладнений канал основної вербальної комунікації. Оскільки запропонований підхід є загальним, то будуть проведені дослідження можливості його використання для інших мов.

Список використаних джерел

1. *Augmentative and Alternative Communication (AAC)* [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://www.asha.org/public/speech/disorders/AAC>.
2. Кривонос Ю.Г. Новые средства альтернативной коммуникации для людей с ограниченными возможностями / Ю.Г. Кривонос, Ю.В. Крак, А.В. Бармак, Р.А. Багрий // Кибернетика и системный анализ. – 2016. Т 52. – № 5. – С. 3–13.
3. Jurafsky, D. *Speech and Language Processing* / D. Jurafsky, J. H. Martin. – 2nd – New Jersey: Prentice Hall, 2008. – 1024 p.
4. *Generate statistical n-gram data from text* [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://www.carta.tech/man-pages/man1/text2ngram.1.html>.
5. Thorsten B. *Large Language Models in Machine Translation* / Thorsten Brants, Ashok C. Popat, Peng Xu, Franz J. Och, Jeffrey Dean // *Proceedings Joint Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and Computational Natural Language Learning*. 2007. – p. 858–867.

References

1. *Augmentative and Alternative Communication (AAC)* [Online]. – Available from: <http://www.asha.org/public/speech/disorders/AAC>
2. KRYVONOS Y.G. KRAK Y.V., BARMAK A.V., BAGRIY R.A. (2016) New tools of alternative communication for persons with verbal communication disorders. *Cybernetics and system analysis. Volume 52, № 5*, pp. 3-13.
3. JURAFSKY D., MARTIN J.H. (2008) *Speech and Language Processing. 2nd. New Jersey: Prentice Hall*, p. 1024.
4. *Generate statistical n-gram data from text* [Online]. – Available from: <https://www.carta.tech/man-pages/man1/text2ngram.1.html>
5. THORSTEN BRANTS, ASHOK C. POPAT, PENG XU, FRANZ J. OCH, JEFFREY DEAN (2007) *Large Language Models in Machine Translation. Proceedings Joint Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and Computational Natural Language Learning*, pp. 858–867.

Надійшла до редколегії 20.02.2017

УДК 517.9

Івохін Є.В., д.ф.-м.н, професор,
Науменко Ю.О., аспірант

Про окремі математичні моделі процесу розповсюдження реклами в соціумі

Київський національний університет
імені Тараса Шевченка, м.Київ, пр-т Глушкова,
4д, e-mail: ivohin@univ.kiev.ua

Ivohin E.V., Dr.Sci., professor,
Naumenko Yu.O., postgraduate

About some mathematical models of the advertising distribution in socium

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: ivohin@univ.kiev.ua

У даній роботі змодельовано та досліджено процес розповсюдження реклами шляхом комунікації в межах заданої цільової аудиторії. Використано підходи, що базуються на моделях соціальної та фізичної аналогії процесів обміну інформацією у соціальній мережі. Результати отримано для визначеного рівня взаємної довіри користувачів та заданого порогу сприйнятливості до реклами в осіб цільової аудиторії, а також на основі використання моделей дифузії інформації у соціальній групі.

Ключові слова: реклама, процес розповсюдження, моделювання, модель нейронподібного обміну інформації.

In this article a process of the advertisement spreading via communications within a given target audience and without means of mass media was modeled and studied. We are using a model that describes the process of communication within the group, so that more users will be interested in advertised product. The proposed models are formed based on the method of formalizing the processes of penetration (spread) of the influence of advertising on a given target audience. Approaches based on models of social and physical analogies of information exchange processes in the social network are used.

Further on the model gets complicated by implementing the assumption that not all people are positive about advertising, and their attitude may change not only from neutral to positive. So the negative reaction to advertisement is described and counted. With the quantity of people which are positive- and negative-opinionated to advertisement an efficiency rating is build. This rating makes it possible to draw conclusions about the effectiveness of the advertising campaign at any given time, determine the effectiveness of the advertisement for a certain time interval as an average weighted estimate and compare the efficiency of advertisement campaign in different time intervals.

On the basis of the Kermann-McKendrick model a system of differential equations that describes the process of disseminating advertising information is written. Numerous experiments were carried out that allowed us to conclude the adequacy of the calculation methods.

Key words: advertising distribution process, simulation, model of the interneural exchange.

Статтю представив д.т.н., проф. Волошин О.Ф.

Прийнято вважати, що вимірювання ефективності реклами є досить складною проблемою. Деякі вважають її нерозв'язною, інші пропонують як прості, так і складні рішення. Проте, абсолютно усі дотримуються думки, що вимірювати ефективність реклами треба. За визначенням Россера Рівса, реклама є «мистецтвом впровадження унікальної торгової пропозиції в голови найбільшого числа людей при найменших витратах», що необхідно розуміти як спосіб мінімізації витрат на рекламу з метою запобігання банкрутству. З іншого боку, мінімізація витрат без вимірювання ефективності неможлива.

Головною проблемою визначення оптимального рекламного бюджету є визначення величини бюджету, що дозволив би одержати гарантовану

віддачу від реклами. Будь-яке відхилення від оптимальності приводить до неефективності [1].

Розробка методик формування якісного рекламного бюджету приводить до необхідності створення нових способів формалізації процесів, що відбуваються у суспільстві з урахуванням особливостей сучасних потоків розповсюдження інформації. Дослідження та моделювання цих процесів базуються на використанні математичних структур та схем, які є подальшим розвитком традиційних статистичних підходів.

У даній роботі сформовано та досліджено процес розповсюдження реклами в межах деякої цільової аудиторії. Моделі описують процеси розповсюдження реклами на основі обміну інформацією, що відбувається при комунікації

між людьми. Для формалізації впливу інформаційних потоків пропонується використати різні моделі обміну інформації у соціальній мережі [2].

Нейроноподібна модель процесу розповсюдження реклами в межах цільової аудиторії.

Розглянемо соціальну мережу S , що складається з заданої N кількості користувачів. Будемо вважати користувачів вузлами нейронної мережі, які обмінюються між собою повідомленнями (пакетами даних). Математичну модель функціонування обміну інформацією в рамках мережі будемо формувати на основі підходу [3], що використовується для аналізу процесів у нейронах і часто застосовується при дослідженні задач з імпульсним впливом.

Кожна особа знайома або має можливість спілкуватися з певною кількістю n_i , $i = \overline{1, N}$ інших людей з цієї аудиторії. Без обмеження загальності вважається можливим, що існують такі номери $k = \overline{1, N}$ користувачів мережі, для яких $n_k = N - 1$. З іншого боку, зрозуміло, що, якщо дописувач мережі i знайомий з дописувачем j , то й j буде знайомий з i . Таку структуру можна представити графом, де кожна вершина графа представляє собою користувача, а ребро між двома вершинами означає те, що особи знайомі або спілкуються між собою. Цей граф задається симетричною матрицею інцидентності розмірності $N \times N$ $R = \{r_{ij}\}$, $i = \overline{1, N}$, $j = \overline{1, N}$, що складається з 0 та 1, де 0 у позиції (i, j) означає, що людина i не знайома з людиною j , а 1 – що людина i знайома з людиною j .

Кожну людину з цільової аудиторії характеризує також набір додаткових параметрів. По-перше, кожен неоднаково ставиться до побаченої/почутої реклами: в даній моделі кожна людина має свій коефіцієнт I_i , $I_i \in [0, 1]$, $i = \overline{1, N}$, що відображає її сприйнятливість до реклами. По-друге, кожен по-різному сприймає вплив з боку свого мережевого оточення. Визначимо вектор, що задає рівень довіри i -ї людини до кожного з її дописувачів, у вигляді $T_i = (t_{i1}, t_{i2}, \dots, t_{iN})$, $i = \overline{1, N}$, де $t_{ij} \in [0, 1]$, $t_{ij} = 0$, якщо відповідне $r_{ij} = 0$, r_{ij} – j -й елемент i -го рядка матриці R , $t_{ii} = 1$, $i = \overline{1, N}$, $j = \overline{1, N}$.

Припустимо, що перед початком моделювання процесу розповсюдження реклами проведено певну рекламну кампанію. Дослідимо, яким чином буде змінюватися рівень розповсюдження реклами серед певної цільової аудиторії, застосовуючи описану вище модель.

Задамо певний поріг сприйнятливості до реклами L , $L \in [0, 1]$. При цьому будемо вважати, що реклама ефективно подіяла на людину i , якщо її ставлення $I_i \geq L$. Введемо вектор H_0 , $H_0 = (h_1, h_2, \dots, h_N)$, де $h_i = 0$, якщо $I_i < L$ та $h_i = 1$ при $I_i \geq L$. Цей вектор характеризує осіб з цільової аудиторії, на яких подіяла реклама до моменту початку спілкування.

Вважаємо, що у мережі відбувається обмін інформацією між користувачами. Сприятливість до реклами кожного учасника може з часом змінитись в залежності від його оточення. Зміну сприйнятливості з часом будемо описувати моделлю нейроноподібного елементу вигляду

$$\frac{dI_i(t)}{dt} = \frac{1}{n_i + 1} \sum_{j=1}^N t_{ij} I_j(t) - I_i(t). \quad (1)$$

Зміна ставлення кожної людини з цільової аудиторії спостерігається дискретно. Показавши без обмеження загальності інтервал дискретизації $\Delta t = 1$, отримуємо рівняння наступного вигляду:

$$I_i(t+1) - I_i(t) = \frac{1}{n_i + 1} \sum_{j=1}^N t_{ij} I_j(t) - I_i(t), \quad (2)$$

або остаточно

$$I_i(t+1) = \frac{1}{n_i + 1} \sum_{j=1}^N t_{ij} I_j(t). \quad (3)$$

Таким чином, на кожному послідовному кроці дискретизації перераховуються коефіцієнти ставлення до реклами кожної особи на основі середнього значення думки оточення людини з урахуванням рівня її довіри до кожного з даного оточення.

Як результат отримуємо новий набір значень $I_i(t)$, $i = \overline{1, N}$, $t > 0$, після чого обчислюємо новий вектор $H(t)$ відповідно до порогу L .

Якщо на деякому кроці виконується співвідношення $H(t) = H(t-1)$, $t \geq 1$, тобто реклама більше не вплинула на жодну особу з аудиторії, або, якщо вектор $H(t) = (1, 1, \dots, 1)$, тобто усі особи вже знаходяться під впливом реклами, – алгоритм зупиняється.

Врахування негативного ставлення до реклами.

Ускладнимо модель впливу та розповсюдження реклами в межах цільової аудиторії припущенням, що не всі люди позитивно ставляться до реклами, а їх відношення може змінюватися не лише від нейтральності до позитивності. Для відображення переходу до негативного ефекту в процесі розповсюдження реклами будемо використовувати наступний підхід.

Аналогічно порогу сприйнятливості реклами L введемо поріг рівня Z , що відповідає за негативне відношення до реклами. Якщо на певному кроці сприйнятливості i -ї особи до реклами $I_i(t)$ стає меншою за Z ($I_i(t) \leq Z$), то вважаємо, що дана особа починає негативно ставитися до реклами. Негативне відношення до реклами суттєво не змінює схему алгоритму моделювання. З тим самим інтервалом дискретизації $\Delta t = 1$ на кожному кроці відбувається, як і раніше, зміна вектору $H(t)$, $t > 0$, що характеризує вплив реклами на осіб з цільової аудиторії. Використовуючи поріг Z , можна спостерігати за зміною негативного ставлення до процесу розповсюдження реклами.

Таким чином, на кожній ітерації можна порахувати кількість осіб, що перейшли до позитивного ставлення, та кількість осіб, що стали негативно відноситися до реклами. Позначимо через $E^+(t)$, $t > 0$, - кількість осіб, для яких у проміжок часу $[t-1, t]$ справедливій нерівності $h_i(t) > h_i(t-1)$, $i = \overline{1, N}$, а через $E^-(t)$, $t > 0$, - відповідно, кількість осіб, для яких $h_i(t) < h_i(t-1)$, $i = \overline{1, N}$.

За допомогою величин $E^+(t)$ та $E^-(t)$, $t > 0$, запишемо оцінку ефективності розповсюдження реклами, яка фактично є аналогом рентабельності

$$E(t) = 1 + \frac{E^+(t) - E^-(t)}{N}, \quad t > 0. \quad (4)$$

Ця оцінка дає можливість зробити висновки щодо ефективності рекламної кампанії у довільний момент часу $t > 0$; визначити ефективність реклами за певний інтервал часу, як середню зважену оцінку, що базується на значеннях даного критерію в кожний момент часу з цього проміжку; та, порівнюючи між собою значення ефективності на різних інтервалах часу, зробити загальні висновки щодо розвитку та успішності рекламної кампанії.

З формули (4) зрозуміло, що усі значення показника належать проміжку $[0, 2]$. Величина $E(t) = 1$ трактується як така, за якою ефективність реклами має нейтральний ефект (викликає рівну кількість позитивних та негативних відгуків) у цільовій аудиторії. При значеннях $E(t) > (<) 1$ ефективність реклами характеризується відповідним позитивним (негативним) ефектом.

Необхідно також звернути увагу на залежність алгоритму від вибору порогових значень L та Z , а також від величин рівнів взаємної довіри, що подаються векторами T_i , $i = \overline{1, N}$. Відповідні

дослідження можливі з використанням, наприклад, елементів теорії динамічного соціального впливу Латане [4].

Гібридні математичні моделі процесу розповсюдження реклами.

Модель впливу реклами в межах соціальної групи заданого обсягу.

Позначимо $u(x, t) : (x, t) \rightarrow [0, 1]$, $t \in [0, T]$, - функцію рівня розповсюдження реклами в межах заданої соціальної групи обсягу x , що не перевищує наперед визначеної величини A , $0 \leq x \leq A$.

Змоделюємо зміну впливу (концентрації) реклами за допомогою рівняння дифузії [5]. Цей процес аналогічний розповсюдженню деякої речовини протягом конкретного часового інтервалу $t \in [0, T]$ і може бути описаний рівнянням:

$$\frac{du}{dt} = -k(t) \frac{d^2 u}{dx^2}, \quad (5)$$

з початковою умовою $u(x, 0) = 0$ та крайовою умовою $u(A, t) = 1$, де $k(t)$ - коефіцієнт, що характеризує вплив реклами (аналог коефіцієнта дифузії) і є пропорційним швидкості зміни рекламозалежної частини соціальної групи.

Склад групи розбивається на 3 підгрупи: на чутливих до реклами y_1 , тих, що вже знаходяться під впливом реклами y_2 , і байдужих до реклами y_3 . На основі моделі Кермана-Маккендріка [6] запишемо систему диференціальних рівнянь, що описує процес розповсюдження рекламної інформації. Її розв'язки, відповідно, визначають кількості окремих груп:

$$\dot{y}_1 = -y_1 y_2, \quad \dot{y}_2 = y_1 y_2 - y_2, \quad \dot{y}_3 = y_2. \quad (6)$$

Відзначимо, що за такою постановкою величина A залежатиме від часу, при чому $A = A(t) = y_1(t) + y_2(t)$. Крім цього, можна покласти $k(t) = \mu \equiv \text{const}$.

Шукаємо функцію $u(x, t)$ у вигляді $u(x, t) = X(x(t))$. Тоді для будь-якого моменту часу $t \in [0, T]$ отримуємо величину рівня впливу реклами у вигляді $u(x, t) = \mu(1 - e^{-x(t)/\mu})$, $0 \leq x(t) \leq y_1(t) + y_2(t)$, $y_1(t), y_2(t)$ - компоненти розв'язку системи (6).

Цей розв'язок може бути узагальнений за умов припущення, що частина групи, яка має імунітет до реклами, може через деякий час його втратити. Частина групи стає при цьому чутливою до реклами, збільшуючи групу $y_1(t)$, і процес періодично повторюється.

Модель розповсюдження реклами за умов дифузії товарів.

Як і у попередньому випадку, позначимо через $u(x, t)$ функцію рівня розповсюдження реклами за умов наявності заданої кількості товарів x , яка не перевищує наперед визначеної величини A , $0 \leq x \leq A$.

Процес розповсюдження реклами за умов зміни кількості товарів на ринку протягом конкретно заданого часового інтервалу $t \in [0, T]$ може бути описаний рівнянням (5) з початковою умовою $u(x, 0) = 0$ та крайовою умовою $u(A, t) = 1$, в якому $k(t)$ - коефіцієнт, що характеризує зміну впливу реклами з часом. Цей коефіцієнт вважаємо пропорційним швидкості зміни кількості товару.

Припустимо, що продаж товару проводиться у M торгових точках. Опишемо процес зміни товарного обсягу на основі математичної моделі нейрону [3].

Маємо

$$\dot{x}(t) = -x(t) + \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M x_i(t), \quad x(0) = A, \quad (7)$$

де $x_i(t)$ - сумарна кількість товару, що була продана i -ю торговою точкою до моменту часу t .

Таким чином, припускаючи, що $k(t) = \dot{x}(t)$, отримуємо гібридну модель вигляду (5), (7) для розрахунку рівня розповсюдження реклами за

результатами даних про продаж товарів. Шукаючи функцію $u(x, t)$ у вигляді $u(x, t) = X(x(t))$, визначаємо рівень реклами для кожного моменту часу t в межах можливого обсягу товарів $0 \leq x \leq x(t)$, поточне значення якого $x(t)$ отримуємо з рівняння (7).

Було проведено чисельні експерименти, які дозволили зробити висновок про адекватність отриманих на основі запропонованих підходів розрахунків результатам спостереження за реальними процесами зміни рекламного впливу.

Висновок.

У роботі змодельовано та досліджено процес розповсюдження реклами на основі комунікації в межах заданої цільової аудиторії.

Запропоновані моделі формуються на основі методики формалізації процесів проникнення (розповсюдження) впливу реклами на задану цільову аудиторію. Використано підходи, що базуються на моделях соціальної та фізичної аналогій процесів обміну інформацією у соціальній мережі. Результати отримано для визначеного рівня взаємної довіри користувачів та заданого порогу сприйнятливості реклами в осіб цільової аудиторії, а також на основі використання моделей дифузії інформації у соціальній групі.

Список використаних джерел

1. Шведун В.А. Разработка методического обеспечения формирования совокупного рекламного бюджета предприятия // БизнесИнформ. – 2008. – № 9. – С. 60-68.
2. Івохін Є.В. Про один підхід до моделювання розповсюдження реклами як процесу агрегації, обмеженої дифузією / Є.В. Івохін, Ю.О.Науменко // Вісн. КНУ імені Тараса Шевченка. Сер. фіз.-мат. науки. – 2016. – №2. – С.98-101.
3. Jang J.S. Neuro-Fuzzy and soft computing / J.S. Jang, C.T. Sun, E. Mizutani – N.Y.: Prentice Hall, 1997. - 176 p.
4. Latane B. The psychology of social impact/ B. Latané // American Psychologist. – 1981. – V. 36. – P. 343–356.
5. Араманович И.Г. Уравнения математической физики / И.Г.Араманович, В.И. Левин. – М.: Наука, 1969. - 288 с.
6. Хайрер Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений / Э.Хайрер, С. Нерсетт, Г.Ваннер. - М: Мир, 1990.-512с.

References

1. SHVEDUN V. (2008) *Razrabotka metodicheskogo obespecheniya sovokupnogo reklamnogo budzeta predpriyatiya*// BisnesInform. – 9. – P. 60-68.
2. IVOHIN E. and NAUMENKO Yu. (2016) *About one approach to modeling the distribution of advertising as a process of aggregation limited by diffusion*// Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Phys.&Math. – 2. – P. 98-101.
3. JANG J., SUN C. and MIZUTANI E. (1997) *Neuro-Fuzzy and soft computing*. N.Y.: Prentice Hall. - 176 p.
4. LATANE B. (1981) *The psychology of social impact*// American Psychologist. – V. 36. – P. 343–356.
5. ARAMANOVICH I. and LEVIN V. (1969) *Urvneniya matematicheskoy fiziki*. M.: Nauka. - 288 s.
6. HAIRER E., NORSETT S. and WANNER G. (1990) *Reshenie obyknovennykh differentsialnykh uravneniy*. M: Mir. - 512 p.

Надійшла до редколегії 12.03.2017

УДК 519.7

Кузьмич О.І.¹, к.ф.-м.н., доц.
Мекуш О.Г.¹, к.ф.-м.н., ст.викладач
Протасюк Н.А.², ст.викладач

**Аналіз стійкості руху мобільних роботів.
Застосування до задачі аналізу руху
літака по злітній смузі**

¹ Східноєвропейський національний
університет імені Лесі Українки, 43000,
м.Луцьк, просп. Волі, 13.

² Коледж технологій, бізнесу та права
Східноєвропейського національного
університету імені Лесі Українки, 43010,
м.Луцьк, просп. Волі, 51.

e-mail: kuzmych79@gmail.com
mekush77@gmail.com
vyhovna-ctbl-eenu@meta.ua

O. I. Kuzmych¹, PhD, associate professor
O.G. Mekush¹, PhD, lecturer
N.A. Protasiuk², lecturer

**Analysis of mobile robot motion stability.
Application to the problem of analyzing the
motion of aircraft on runway**

¹ Lesya Ukrainka Eastern European National
University, 43000, Lutsk, Voli ave., 13.

² College of Technologies, Business and Law of
Lesya Ukrainka Eastern European National
University, 43010, Lutsk, Voli ave., 51.

e-mail: kuzmych79@gmail.com
mekush77@gmail.com
vyhovna-ctbl-eenu@meta.ua

У роботі представлено моделювання та аналіз динаміки мобільного робота в програмному середовищі, що дає можливість пояснити деякі динамічні ефекти, які призводять до нестійкості прямолінійного руху робота та заносів на поворотах при великих швидкостях. Дана модель застосована для аналізу динаміки колісних літаків, що дозволяє дослідити одну з актуальних задач, які постають у сучасному моделюванні літакобудування - питання стійкості літака відносно взаємного розміщення коліс і центру мас під час його руху по злітній смузі. Використано інструмент чисельного моделювання динамічних систем MatLab (версія 7.6.0 (R2008a)), з допомогою якого побудовані фазові траєкторії кутової та лінійної швидкостей. Проведено аналітичне дослідження траєкторії руху розглянутого мобільного робота для пояснення динамічних нетривіальних ефектів, що виникають під час руху літаків по злітній смузі. Крім того, даються рекомендації з оптимальної конструкції шасі для уникнення явища нестійкості руху. Обговорюється використання даних результатів та програмного середовища у навчальному процесі та в галузях проектування складних технічних систем з метою створення найбільш досконалих робототехнічних комплексів, що мають широке застосування.

Ключові слова: мобільний робот, стійкість літака, моделювання систем, програмне середовище MatLab.

The paper presents the mathematical modeling, simulation and analysis of the dynamics of a mobile robot in the software environment, which makes it possible to explain some dynamic effects that lead to instability of the straight-line robot movement and skidding at bends at high speeds. This model is used to analyze the dynamics of wheeled aircraft, which allows to investigate one of the actual problems that arise in modern aircraft design - the question of the stability of the aircraft concerning to the mutual placement of the wheels and the center of mass during its movement along the runway. MatLab as numerical tool for simulation of dynamic systems (version 7.6.0 (R2008a)) has been used, with the help of which the phase trajectories of angular and linear velocities are constructed. An analytical study of the trajectory of the motion of the considered mobile robot was conducted to explain the dynamic non-trivial effects that arise during the flight of aircraft in the runway. In addition, recommendations are given on the optimal chassis design to avoid the phenomenon of instability motion. The use of these results and the software environment in the learning process and in the design of complex technical systems is being discussed in order to create the most advanced robotic systems that are widely used.

Keywords: mobile robot, aircraft stability, simulation of the system, software Matlab.

Статтю представив чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

Вступ

В II пол. 20 століття активізувався інтерес до досліджень, що стосуються впровадження роботів в процес автоматизованого виробництва. Тут потрібно згадати космічних роботів для вивчення поверхні небесних тіл Сонячної системи, роботів для підводних досліджень, роботів, призначених для розмінування підозрілих предметів в місцях скупчення людей, для гасіння пожежі, таких, що здатні самостійно рухатися по заздалегідь невідомій пересічній місцевості, виконувати рятувальні операції під час стихійних лих, аварій атомних електростанцій та ін. У зв'язку з цим з'явилась гостра необхідність створення найбільш досконалих робототехнічних систем, дослідження та тестування яких можна проводити з допомогою прототипів мобільних роботів, які включають широкий спектр - від мікророботів до мехатронних конструкцій досить значних розмірів. Особливо заслуговують на увагу так звані спортивні роботи, для яких проводяться спеціальні змагання для виявлення найкращих технічних параметрів та систем управління при проходженні певних умов. При цьому найгостріша конкуренція і екстремальні умови змагань створюють ідеальні умови для апробації науково-технічних новинок.

У даній роботі розглянута модель колісного мобільного робота, яка може бути прийнята за основу для дослідження динаміки літаків при їх злеті та посадці на злітну смугу.

Дана модель дозволяє дослідити одну з актуальних проблем літакобудування, а саме - стійкість літака при його русі по злітній смузі. Ключову роль при цьому відіграє взаємне розміщення коліс і центру мас літака. Літакобудування є високотехнологічною галуззю, яка інтегрує у собі результати передових теоретичних наукових досліджень та практичних розробок.

Мобільний робот класу "монотип", має трьох-колісне шасі з двома моторизованими колесами, які приводяться в обертання електродвигунами. Крім того, на шасі робота розміщуються датчики, бортовий комп'ютер і система управління рухом.

Передбачається, що умови функціонування (температура, тиск, тощо) не впливають на динаміку даної моделі. Особливий інтерес представляє той факт, що в процесі вирішення задачі управління таким роботом, доводиться залучати методи аналітичної механіки, теорії управління, стабілізації і стійкості. Це пов'язано з тим, що мобільний робот як мехатронна система акумулює в собі компоненти різної фізичної природи. Важливість

досліджень динаміки мобільних роботів, як і робототехнічних систем взагалі, визначається винятковим значенням робототехніки як критичної технології, розвиток якої формує майбутнє науки і світу [1]. На сьогоднішній день опубліковано багато робіт [2-7], присвячених дослідженню різних моделей колісних роботів. Ґрунтовний бібліографічний опис є в [3].

Уже на перших метрах шляху колісного робота його конструктори змушені виявляти факти нестійкості прямолінійного руху та заноси на поворотах на великих швидкостях при певній конструкції шасі. Для пояснення та уникнення цього явища необхідне створення грамотної механіко-математичної моделі та встановлення умов стійкості. В даній роботі виконано моделювання динаміки руху мобільного робота в середовищі MatLab та пояснено виникнення ефекту нестійкості. Такими задачами займалися також П. Апель, П.В. Воронцов та С.А. Чаплигін. На основі моделювання встановлено, що описані нетривіальні динамічні ефекти виникають в залежності від конструкції шасі робота, а саме - взаємного розміщення центра мас, ведучих коліс і третього колеса. Це твердження підтверджено експериментально [8-12].

Модель динаміки мобільного колісного робота

Розглянемо мобільний робот, який має два незалежно керованих моторизованих колеса. Нехай рух робота відбувається в горизонтальній площині, третє колесо робота вважається безінерційним, позбавленим тертя і закріпленим на шасі робота. На рис. 1 наведено загальний вигляд шасі мобільного робота. При прийнятих припущеннях його рух повністю визначається координатами (x, y) , точки A - центру відрізка, що з'єднує провідні колеса шасі, і кутом повороту φ , відлічуваним від осі OX .

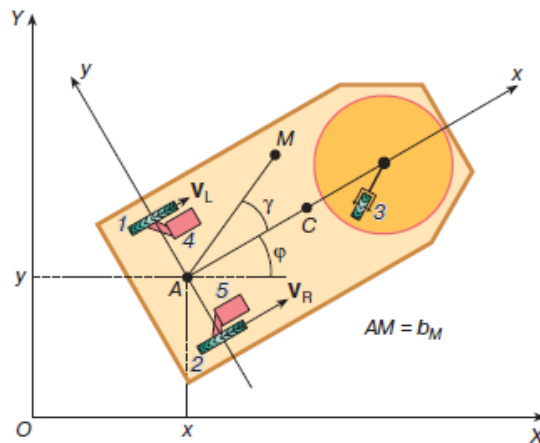


Рис. 1. Схема шасі мобільного робота

Рух усіх коліс відбувається без прослизання. Провідні колеса 1 і 2 мають радіус r і приводяться в обертання однаковими двигунами 4 і 5 відповідно, на які подаються керуючі напруги: U_L - для лівого колеса 1, U_R - для правого колеса 2. Поворот робота здійснюється за допомогою різниці зазначених керуючих напруг.

Рух робота розглядається відносно нерухомої системи координат OXY . Рухомою системою координат Axy з початком в точці A жорстко пов'язана з шасі робота. Вісь OX перпендикулярна відрітку, що з'єднує центри ведучих коліс, і є віссю симетрії шасі. Позитивний напрямок осі OX збігається з напрямком руху робота. Центр мас робота знаходиться в точці C ; абсцису точки C в рухомій системі позначимо через a . При позитивних значеннях a центр мас і третє колесо знаходяться попереду ведучих коліс.

Динаміка руху робота описується нелінійною системою диференціальних рівнянь [12]. Модуль V швидкості центра мас та кутова швидкість Ω робота задовольняють динамічним рівнянням:

$$\begin{aligned}\dot{V} &= -\frac{2c_2}{mr^2}V + a\Omega^2 + \frac{c_1}{mr}(U_L + U_R), \\ \dot{\Omega} &= -\frac{2c_2l^2}{I_A r^2}\Omega - \frac{ma}{I_A}V\Omega + \frac{c_1l}{I_A r}(U_R - U_L)\end{aligned}\quad (1)$$

де m - маса корпусу, $I_A = I_C + ma^2$ - його момент інерції. Тут V - лінійна швидкість центра мас, Ω - кутова швидкість робота, $2l$ - відстань між центрами провідних коліс робота.

Розглянемо випадок подачі на двигуни ведучих коліс однакових напруг, що відповідатиме прямолінійному руху. Введемо позначення: $\mu = -\frac{2c_2}{mr^2}$ та $p = \frac{c_1}{mr}(U_L + U_R)$, де μ - параметр, пропорційний коефіцієнту сил в'язкого тертя, p - позитивний параметр, пропорційний сумі напруг, що подаються на провідні колеса робота, a - абсциса центра мас робота в рухомій системі. При позитивних значеннях a центр мас і третє колесо знаходяться попереду ведучих коліс. Величина $\frac{1}{\rho^2} = \frac{m}{I_A}$, де ρ - радіус інерції робота щодо осі, що проходить через центр мас. Тоді у разі однакового розподілу напруг, що подаються на двигуни ведучих коліс, диференціальні рівняння руху мобільного робота мають вигляд:

$$\begin{aligned}\frac{dV}{dt} &= -\mu V + a\Omega^2 + p, \\ \frac{d\Omega}{dt} &= -\mu \frac{l^2}{r^2}\Omega - \frac{a}{\rho^2}V\Omega\end{aligned}\quad (2)$$

Моделювання у середовищі МатЛаб

Розглянемо дану модель динаміки робота (2) та проведемо її моделювання в середовищі MatLab на базі використання солвера розв'язання систем диференціальних рівнянь "ode45".

1. Розглянемо випадок позитивного значення параметра a , тобто випадок, коли центр мас і третє колесо знаходяться попереду ведучих коліс.

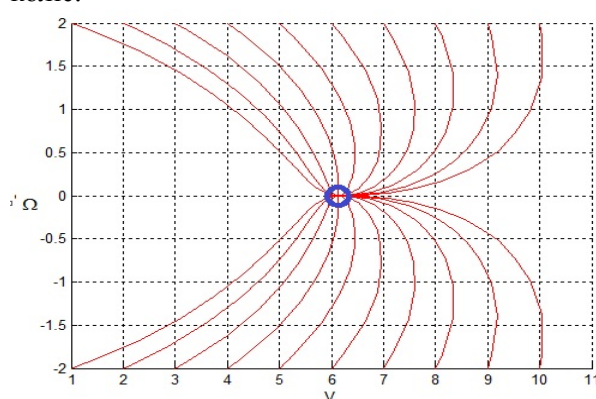


Рис. 2. Фазовий портрет при $a > 0$

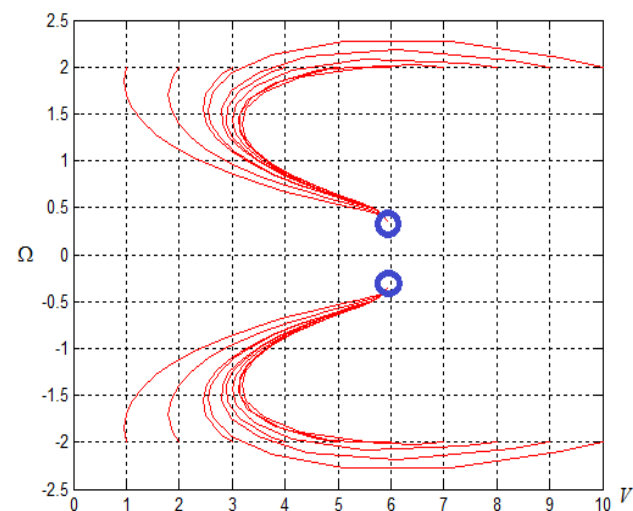


Рис. 3. Фазовий портрет при $a < 0$

Фазовий портрет системи (1) в цьому випадку показаний на рис. 2, система демонструє стійку поведінку розв'язку, і, відповідно, стійку особливу точку типу «вузол». Бачимо, що лінійна швидкість з часом прямує до сталого значення 6, а кутова швидкість прямує до нуля. Тобто, ефекту «закручення» та заносів на поворотах в цьому випадку не буде.

2. Інша ситуація виникає, коли параметр a від'ємний, тобто центр мас і третє колесо знаходяться позаду ведучих коліс робота. При збільшенні напруги, що подається на двигуни, і зростанні його швидкості спостерігається наявність 2-х особливих точок системи. При цьому бачимо (рис. 3), що лінійна швидкість прямує до сталого значення 6, та кутова швидкість набуватиме сталого додатного значення 0,35, тобто появи незначного обертального руху з постійною кутовою швидкістю. Це, звичайно, призведе до появи ефекту заносів на повороті.

Розглянемо детальніше випадок нестійкого руху і продемонструємо як можна аналізувати динаміку системи з допомогою MatLab-симуляції. Це дозволить використати цей метод в навчальному процесі при вивченні задач аналізу динамічних систем. Для цього використаємо наступні початкові дані:

$m = 12 \text{ кг}$; $I_A = 0,75 \text{ кгм}^2$; $r = 0,08 \text{ м}$; $l = 0,2 \text{ м}$;
 $h = 0,56 \text{ м}$; $c_1 = 0,084 \text{ Н} \cdot \text{м} / \text{В}$; $c_2 = 0,084 \text{ Н} \cdot \text{м} \cdot \text{с}$.

На рис. 4 показано результат моделювання при $\mu = 2,18$, $p = 70,035$, на рис. 5 – проведено моделювання при зменшенні поданих напруг, що відповідає коефіцієнту $p = 60,035$, $\mu = 2,18$, (червоні траєкторії). З графіка рис. 5 (сині траєкторії) бачимо, що при зменшенні відстані до $a = 9$ та коли напруга залишається незмінною, маємо дві нові точки рівноваги. Вони показують що рівноважне значення лінійної швидкості є більшим, а кутової швидкості зменшується, що буде дещо зменшувати ефект заносів на поворотах. Ці результати моделювання означають, що у випадку, коли провідні колеса знаходяться попереду центру мас, мобільний робот може здійснювати стійкий прямолінійний рух тільки зі швидкістю, що не перевищує деякого граничного значення. З ростом напруги, що подається на двигуни, швидкість робота збільшується. Після досягнення зазначеного граничного значення прямолінійний рух стає нестійким, робот “закручує”, і він прагне до одного з обертальних рухів. Напрямок визначається малими збуреннями, що існують при русі реального робота.

У випадку, коли третє колесо знаходиться попереду ведучих коліс, робот може стійко рухатися по прямій з будь-якою швидкістю. Зрозуміло, що спеціальна система управління може стабілізувати рух робота і в разі, коли ведучі колеса знаходяться попереду, проте алгоритм цієї системи управління повинен

враховувати природу нестійкості, яка визначається диференціальними рівняннями (2).

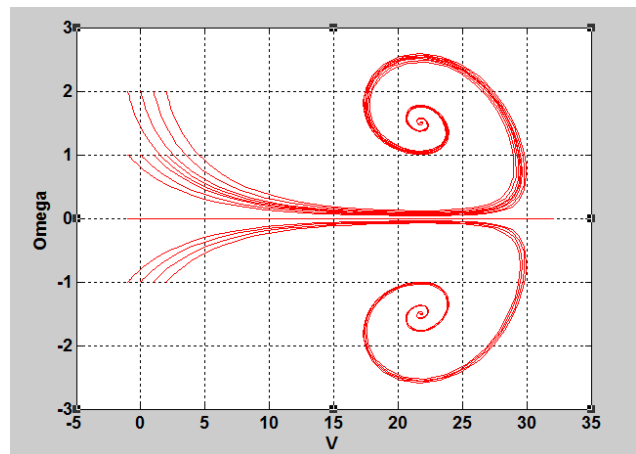


Рис. 4. Фазові траєкторії при $\mu = 2,18$, $p = 70,035$.

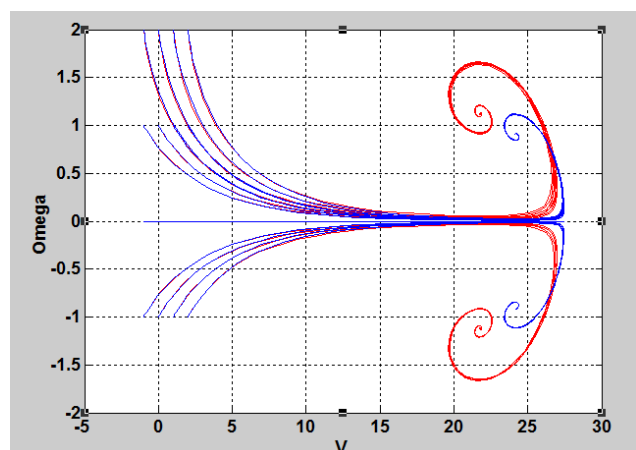


Рис. 5. Фазові траєкторії. Моделювання при зменшенні параметра a (сині лінії).

Аналіз динаміки руху літака по злітній смузі

За кількістю опор шасі літаки поділяються на трьохопорні з передньою опорою, трьохопорні з хвостовою опорою. Найбільш поширеною є трьохопорна схема з передньою опорою, яка запобігає капотуванню і “козління” літака.

Шасі призначене для стоянки і пересування літака по землі. Воно оснащено амортизаторами, що поглинають енергію ударів при посадці і при пересуванні по землі, і гальмами, що забезпечують гальмування літака при пробігу і рулінні. Для стійкого положення літака на землі необхідні мінімум три опори. Залежно від розташування опор шасі щодо центра ваги літака розрізняють наступні основні схеми: на рис. 6 - з

передньою опорою, на рис.7 - з хвостовою опорою.

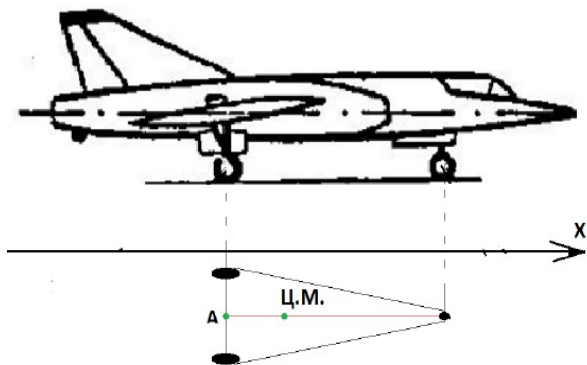


Рис. 6. Розташування опор шасі з передньою опорою.

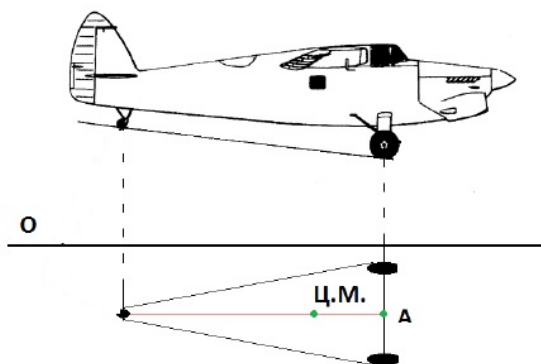


Рис.7. Розташування опор шасі з хвостовою опорою.

Схема шасі і її параметри визначають характеристики стійкості і керованості літака при його русі по ґрунту, впливають на навантаження опор. Триколісна схема шасі з передньою опорою характеризується наявністю двох основних опор, розташованих трохи позаду центру ваги, і однієї передньої, винесеною на значну відстань вперед від центру ваги літака. Така схема прийшла на зміну схемою шасі з хвостовою опорою.

Аналіз показує, що мобільні роботи є надзвичайно зручним об'єктом для аналізу динамічних ефектів, що виникають при русі літака по злітній смугі. Зауважимо, що саме варіант коли третє колесо знаходиться попереду ведучих коліс, вибирається при конструюванні шасі великих літаків, що вказано також у [5].

Через недостатню стійкість триколісної схеми шасі з хвостовою опорою в даний час застосовуються рідко, в основному на легких навчальних і допоміжних літаках.

Саме тому на сучасних літаках найбільшого поширення набула триколісна схема шасі з передньою опорою. Технічно це обґрунтовується

наступним: носова стійка оберігає літак від капотування, що дозволяє більш енергійно загальмувати колеса; запобігає “козління” літака, тому що центр ваги розташовується попереду основних коліс, і при ударі основними стійками по злітно-посадковій смугі (ЗПС) при посадці кут атаки і коефіцієнт підйомної сили крила зменшуються. Крім цього горизонтальне положення осі фюзеляжу забезпечує хороший огляд екіпажу, створює зручності для пасажирів, полегшує завантаження літака важкими вантажами, дозволяє розміщувати реактивні двигуни горизонтально, при цьому газовий струмінь не руйнує аеродрому, забезпечує літаку хорошу стійкість при пробігу і розбігу.

Висновки

Результати даних досліджень є актуальними і вагомими, так як аналіз динаміки мобільного робота дає змогу пояснити ефекти, що призводять до фактів нестійкості при функціонуванні роботоподібних систем та літальних апаратів, які мають подібну конструкцію. Дана модель дозволяє аналізувати та допомагає вирішувати проблему стійкості у сучасному літакобудуванні під час руху літака по злітній смугі. Вдосконалені мобільні роботи можуть також застосовуватись в таких напрямках як поточний моніторинг важкодоступних або небезпечних зон промислових будівель (ракетні шахти, радіоактивні саркофаги). Оперативне втручання мобільного робота в приховані явища дозволить запобігти таким процесам як зростання тріщин, корозій, руйнування конструкцій, дозволить зменшити ступінь участі людини при проведенні робіт в небезпечних умовах, при техногенних аваріях та катастрофах. У зв'язку з цим досить важливим є створення робототехнічних комплексів, призначених для проведення робіт з попередження або ліквідації наслідків позаштатних ситуацій. Це сприятиме виконанню робіт в небезпечних зонах (розвідка, взяття проб, земляні роботи, демонтаж і руйнування будівельних конструкцій і промислового устаткування, транспортування небезпечних предметів); виконанню робіт при ліквідації наслідків надзвичайних ситуацій (огляд місць аварій, розбирання і руйнування пошкоджених конструкцій, маніпуляції з радіоактивними і сильнодіючими отруйними речовинами, боротьба з вогнем); проведенню вибухотехнічних робіт (пошук, витяг, транспортування і знешкодження або знищення вибухонебезпечних предметів і боєприпасів; вибухові роботи).

Список використаних джерел

1. Павловский В.Е. Нелинейная динамика: мобильные роботы - специальный выпуск и новый проект «НД» // Нелинейная динамика.- 2011.- Т.7.- №4.- С. 729-732.
2. Буданов В.М. О движении колёсных роботов / Буданов В.М., Девянин Е.А. // ПММ.- 2003.- Т.67.- №2.- С. 244-255.
3. Охоцимский Д. Е. Новые задачи динамики и управления движением мобильных колёсных роботов / Охоцимский Д.Е., Мартыненко Ю.Г. // Успехи механики.- 2003. - Т. 2, № 1. - С. 3-46.
4. Мартыненко Ю.Г. Управление движением мобильных колёсных роботов // Фундаментальная и прикладная математика.- 2005.- Т. 11.- № 8, С. 29—80.
5. Карапетян А.В. Параметрический анализ динамики несимметричного трехколёсного робота / Карапетян А.В., Салмина М.А. // Задачи исследования устойчивости и стабилизации движения.- М.: ВЦ РАН.-2006.- С. 3-11.
6. Павловский В.Е. Динамика, моделирование, управление мобильными роботами / Павловский В.Е., Евграфов В.В., Павловский В.В., Петровская Н.В. // Искусственный интеллект и принятие решений.— 2009. — № 2.-С.14-25.
7. Рапопорт Л.Б. Оценка области притяжения инвариантного множества в задаче управления колёсным роботом / Рапопорт Л.Б., Морозов Ю.В. // Автоматика и телемеханика.- 2008.- № 11.- С. 48-61.
8. Hirose S. Introduction of “Intelligent Sport” // Robotics and Mechatronics.- 1998.- Vol. 10.- № 1.- P. 2—6.
9. Маркеев А. П. О динамике катящегося тела и некоторых курьезных свойствах вращающегося волчка // Соросовский образовательный журнал.- 1998.- № 9.- С. 96—103.
10. Девянин Е. А. О движении колёсных роботов // Доклады научной школы конференции “Мобильные роботы и мехатронные системы”. Москва, 1—3 декабря 1998 года. М.: НИИ механики МГУ.- 1998.- С. 169—200.
11. Белых В. Н. Элементарное введение в качественную теорию и теорию бифуркаций динамических систем // Соросовский образовательный журнал. -1997.- № 1.- С. 115—121.
12. Мартыненко Ю.Г. Динамика мобильных роботов // Соросовский образовательный журнал.-2000.-Т. 6.- №5.-С.111-116.

References

1. PAVLOVSKY V.E. (2011) Nelineynaya dinamika: Mobilnyye roboty - spetsialnyy vypusk i novyy proyekt «ND», *Nelineynaya dinamika*, vol.7, №4, pp. 729-732.
2. BUDANOV V.M., DEVYANIN E.A. (2003) The Motion of Wheeled Robots, *Prikl. Mat. Mekh.*, vol.67, №2, pp. 244-255.
3. OKHOTSIMSKY D.E., MARTYNENKO Y.G. (2003) New Dynamics and Control Problems for Motion of Mobile Wheeled Robots, *Usp. Mekh.*, vol.1, pp. 3—46.
4. MARTYNENKO Y.G. (2005) Wheeled mobile robots motion control. *Fundamental and Applied Mathematics*, vol. 11, №8, pp. 29-80.
5. KARAPETYAN A.V., SALMINA M.A. (2006) Parametricheskiy analiz dinamiki nesimmetrichnogo trekhkolosnogo robota. *Zadachi issledovaniya ustoychivosti i stabilizatsii dvizheniya*. M.: VTS RAN, pp. 3-11.
6. PAVLOVSKY V.E., YEVGRAFOV V.V., PAVLOVSKY V.V., PETROVSKAYA N.V. (2009) Dynamics, modeling, control of mobile robots. *Artificial Intelligence and Decision Making*, №2, pp.14-25.
7. RAPOPORT L.B., MOROZOV Y.V. (2008) Estimating the attraction domain of the invariant set in the problem of wheeled robot control. *Autom. Remote Control*, 69:11, pp. 1859—1872.
8. HIROSE S. (1998) “Introduction of “Intelligent Sport”, *Robotics and Mechatronics*, vol. 10, № 1, pp. 2—6.
9. MARKEEV A. P. (1998) On dynamics of a rolling body and some curious properties of a rotating top. *Soros Educational Journal*, № 9, pp.96-103.
10. DEVYANIN E. A. (1998) On the movement of wheeled robots. Reports of the scientific school of the conference “Mobile robots and mechatronic systems”. Moscow, December 1-3, 1998. M.: Research Institute of Mechanics of the Moscow State University, pp. 169-200.
11. BELYKH V. N. (1997) An elementary introduction to the qualitative theory and the theory of bifurcations of dynamical systems. *Soros Educational Journal*, № 1, pp. 115-121.
12. MARTYNENKO Y.G. (2000) Dynamics of mobile robots. *Soros Educational Journal*, vol. 6, №5, pp. 111-116.

Надійшла до редколегії 02.03.2017

УДК 681.325

Путренко В.В., к.г.н., ст.н.с.,
Пашинська Н.М., к.г.н., ст.н.с.

Інтелектуальний аналіз геопросторових даних як інструмент планування сталого розвитку

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря
Сікорського», м. Київ, пр-т Перемоги, 37,
e-mail: putrenko@wdc.org.ua

Putrenko V.V., PhD, Senior researcher,
Pashynska N.M., PhD, Senior researcher,

Data mining of geospatial data as a tool for sustainable development planning

National Technical University of Ukraine "Igor
Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", 37, Prosp.
Peremohy, Kyiv
e-mail: putrenko@wdc.org.ua

В статті розглянуто основні задачі інтелектуального аналізу геопросторових даних (ІАГД). Виявлено основні передумови формування цього напрямку і його зв'язок з геоінформатикою, системним аналізом і інтелектуальним аналізом даних. У ході дослідження було дано визначення ІАГД, виявлено основні завдання, функції та етапи проведення ІАГД, визначено коло перспективних напрямків розвитку ІАГД і його зв'язок з підтримкою прийняття рішень в регіональному управлінні.

Досліджено застосування трендових геопросторових статистичних моделей в аналізі даних сталого розвитку України. Розглянуто математичний апарат, який використовується при побудові трендових геопросторових статистичних моделей. На прикладі даних ієрархічної моделі сталого розвитку проведено дослідження геопросторових трендів та природи їх виникнення шляхом побудови поліноміальних регресійних моделей, що базуються на обробці геопросторово прив'язаних даних.

Ключові слова: інтелектуальний аналіз, геопросторові дані, ГІС, сталий розвиток, поліноміальні інтерполятори, трендова поверхня.

In this article the basic problems of geospatial data mining (GSDM) were investigated. The basic prerequisites for the formation of this scientific direction and its relation to geoinformatics, systems analysis and data mining were discovered. During study a definition of GSDM was provided. The main tasks, functions and stages of GSDM were identified, range of promising directions of development GSDM and its relationship to support decision-making in the regional administration were defined.

Geospatial trending statistical models for analysis the data for sustainable development of Ukraine were studied. The mathematical apparatus was used in the construction of trend geospatial statistical models. On the example of hierarchical data model of sustainable development a study geospatial trends and the nature of their origin by constructing polynomial regression models based on the processing of geospatial data was attached. The use of cartometric methods for estimate the parameters of geospatial trends was proposed. The application methods for constructing geospatial trends as part of data mining were substantiated.

The applied value of trend analysis is the ability to detect spatial patterns in the distribution of data and establish a general law for their distribution. Trend analysis of sustainable development data allowed us to establish a general trend in the distribution of indices of the index of sustainable development in Ukraine. It was found that it is expedient to use for the detection of spatial tendencies of trend surfaces 1-3 orders.

Keywords: data mining, geospatial data, GIS, sustainable development, polynomial interpolators, trend surface.

Статтю представив д.т.н., проф. Заславський В.А.

1. Вступ. Геоінформаційні технології стали важливою складовою інновацій, які формують сучасний вигляд інформаційного суспільства. Використання геопросторової інформації у вирішенні різних управлінських, бізнесових та інженерних завдань дозволяє підвищити їх ефективність та наочність процесу виконання. Поряд зі специфічним інструментарієм сучасних геоінформаційних систем (ГІС) базовим елементом стали геопросторові дані, що накопичуються у

спеціалізованих сховищах.

Розвиток геопросторової індустрії став можливим завдяки випереджаючому накопиченню геопросторових даних, які надходять із різних джерел. На сьогодні традиційне виробництво геопросторових даних, що ґрунтується на виконанні картографічних та кадастрових робіт, зазнає великих змін. Це пов'язано з подоланням високої вартості цих робіт, зміною суспільного замовлення та еволюцією сучасних інформацій-

них технологій. Постійно розширюється спектр галузей дистанційного зондування Землі, в якому з'являються все нові технічні засоби отримання даних та алгоритми їх подальшої обробки. Технології глобальних навігаційних супутникових систем (найбільш відома американська система GPS - англ. Global Positioning System) стали джерелом постійного потоку геопросторових даних про місцезонаження об'єктів та їх поведінку у просторі. Активно розвивається напрям волонтерського збору геопросторових даних з відкритою ліцензією завдяки таким проектам як OpenStreetMap [1].

Такий лавиноподібний потік накопичення структурованих та неструктурованих даних з геопозиційною складовою призвів до не обхідності використання методів обробки Big Data та інтелектуальних методів аналізу геопросторових даних (ІАГД), що дозволяє виявляти нові знання та закономірності у великих обсягах геоданих.

Тому дослідження особливостей методів інтелектуального аналізу геопросторових даних є актуальним та перспективним напрямом наукових досліджень.

Особливе значення розробка методології та методики інтелектуального аналізу геопросторових даних має для управління територіальним розвитком, як елементом просторової організації суспільства. В цьому контексті інтелектуальний аналіз геопросторових даних може надавати обґрунтовану інформацію і бути складовою систем підтримки прийняття рішень (СППР) на різному адміністративно-територіальному рівні.

2. Огляд літератури. Методологічні підходи до інтелектуального аналізу геопросторових даних почали свій розвиток з середини ХХ сторіччя, коли разом з індустріальним розвитком економіки з'явилась необхідність у дослідженні оптимальних підходів до просторової організації суспільних процесів та охорони і раціонального використання природних ресурсів. Одночасно з цим з кінця 60-х років починається розвиток геоінформаційних систем як інформаційної основи для впровадження методів аналізу даних. Поява високопродуктивних обчислювальних машин разом з розвитком геопросторової індустрії та загостренням проблем економічного розвитку та екологічної ситуації призвели до активізації досліджень інтелектуального аналізу даних та виділення його в окремий напрям.

В Україні таким поштовхом стала катастрофа на Чорнобильській АЕС, яка спонукала широке коло фахівців до використання геоінформаційних технологій при аналізі наслідків радіоактивного забруднення [2]. В галузі інтелектуального

аналізу даних в Україні широко відомі роботи Згуровського М.З., Панкратова Н.Д., Петренко А.І., Болдака А.О., Черняка [3-5].

В ХХІ столітті інтелектуальний аналіз геопросторових даних сформувався в окремий перспективний напрям наукових досліджень, що має свою структуру та особливості використання. Міжнародна дослідницька школа ІАГД сформувалась під впливом багатьох робіт, наприклад, [6-9] та ін.

3. Постановка проблеми. Метою статті є дослідження основ інтелектуального аналізу геопросторових даних, його структури та методів системного використання в процесі підтримки прийняття рішень.

Завданнями статті є формування з системних позицій визначення інтелектуального аналізу геопросторових даних, дослідження структури ІАГД та його місця в ГІС та СППР, аналіз складових процесу ІАГД, вивчення та прикладне застосування основних методів ІАГД.

4. Методичні основи ІАГД. Інтелектуальний аналіз геопросторових даних має глибоке коріння в традиційних областях геопросторового аналізу (наприклад, просторова статистика, аналітична картографія, пошуковий аналіз даних) і різних методах інтелектуального аналізу даних в статистиці та інформатиці. Його мета полягає в інтеграції і подальшому вдосконаленні методів в різних областях для аналізу великих і складних наборів геопросторових даних.

В якості визначення можна запропонувати наступне: інтелектуальний аналіз геопросторових даних (spatial data mining) – напрям геоінформатики, спрямований на системний аналіз геопросторових даних з метою пошуку закономірностей та відносин в даних, які засновані на місцезонаженні та топологічних відношеннях.

ІАГД є зростаючим дослідницьким напрямом, який оперує цілим рядом різних методів, що комбінують обчислювальні, статистичні та візуальні методики. Інтелектуальний аналіз даних та виявлення знань є ітераційним процесом, що включає в себе кілька етапів, включаючи відбір даних, фільтрацію, первинну підготовку та перетворення; аналіз за допомогою обчислювальних алгоритмів і/або підходів з візуалізації, інтерпретації та оцінки результатів; формулювання або модифікацію гіпотез і теорій; корегування даних і методів аналізу; повторну оцінку результатів.

Інтелектуальний аналіз даних та виявлення знань має пошукову природу і є більш індуктивним процесом, ніж традиційні статистичні методи. Це природно вписується в

початкову стадію дедуктивного процесу дослідження, де дослідники розробляють та модифікують теорії, що базуються на відкритій інформації за даними спостережень.

ІАГД знаходиться на перетині ГІС, Data Mining, статистики та прикладних галузей досліджень. З цієї точки зору використання інструментів інтелектуального аналізу даних разом з геоінформаційним блоком є значною перевагою обробки вхідної інформації для управління територією та використання ГІС в СППР. У процесі застосування геоінформаційних технологій в СППР територіального управління можна виділити три базові рівні. До першого, інформаційного рівня відноситься вхідна інформація, яка використовується для обробки в ГІС. Специфічними для використання в ГІС є бази геопросторових даних, дані дистанційного зондування Землі, дані із датчиків та сенсорів з відомими координатами, геотегована інформація з Інтернет та соціальних мереж, історичні картографічні дані, волонтерська географічна інформація та ін. (рис. 1).

Поряд із ними широко використовуються механізми інтеграції просторової та непросторової інформації на основі процесів географічної прив'язки та геокодування. Це надає змогу повноцінно використовувати у ГІС інформацію із зовнішніх непросторових баз даних, які супроводжуються та наповнюються іншими органами управління. Необхідною складовою є бази знань структуровані за предметними галузями, які використовуються у СППР.

Аналітичний блок спирається на використання геоінформаційної системи як платформи для обробки та аналізу вхідної інформації. Тут можуть бути виділені функції стандартизації та нормалізації, сумісної обробки, інтелектуального аналізу даних. На цьому етапі ГІС може взаємодіяти з іншими системами обробки даних та бути складовою СППР.

Ситуаційний рівень пов'язаний з необхідністю прийняття рішень при аналізі конкретних ситуацій за допомогою інструментів СППР та ГІС. Важливим компонентом в цьому випадку стають механізми колективної участі в роботі за участі керівних осіб різних рівнів, експертів технічного персоналу. До таких механізмів відносяться ситуаційні центри, он-лайн конференції, робочі наради та ін.

Процес ІАГД містить основні кроки перетворення даних. Кожний аналіз здійснюється виконавцем з певною метою на основі вхідних баз даних та баз знань, які відповідають проблемному напрямку.



Рис.1. ІАГД в структурі СППР територіального управління

На першому кроці обробка даних здійснюється за допомогою інтерфейсу СКБД. На цьому етапі здійснюється вибірка даних з усієї сукупності збереження даних, проведення простих операцій аналізу даних, які можливо здійснити на основі вбудованих засобів СКБД. На другому кроці відбувається обробка даних за допомогою алгоритмів ІАГД або їх послідовне використання. Отримані результати аналізуються з метою виявлення нової інформації та знань. За результатами цього аналізу відбувається оцінювання результатів обробки та даних і в залежності від того, чи відповідають отримані результати критеріям аналізу процедура аналізу повторюється з іншими параметрами, або отримані результати передаються для прийняття на їх основі рішень (рис.2).

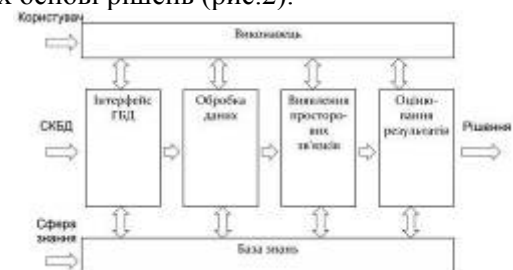


Рис.2. Процес обробки даних в ІАГД

До ІАГД відноситься декілька напрямів, які дозволяють провести різностороннє дослідження даних з урахуванням геопросторової складової. До їх числа відносяться методи класифікації геопросторових даних, кластеризація та регіоналізація, правила асоціацій, геостатистика, геовізуалізація. Цей перелік продовжує розширюватися разом із розвитком ІАГД. Кожний із цих напрямів містить сукупність методів, за допомогою яких відбувається аналіз даних (рис.3).

5. Поліноміальні інтерполятори. Глобальні методи інтерполяції одночасно використовують всі наявні дані для виконання прогнозу для всієї даної території, тоді як локальні методи оперують у межах невеликих зон навкруги

належних інтерполяції вузлів для того, щоб забезпечити виконання оцінки тільки за даними, розміщеними в безпосередній близькості від точок прогнозу або оцінювання.

Глобальні інтерполяції, як правило, використовуються не для безпосередньої інтерполяції, а для дослідження і можливого



Рис.3. Класифікаційна структура методів ІАГД.

видалення ефекту глобальних варіацій (тренда), обумовлених зовнішніми чинниками. Після того як глобальні ефекти будуть видалені, відхилення від глобальних варіацій можуть інтерполюватися з використанням локальних методів.

Глобальні методи є простими для обчислення і часто базуються на стандартних статистичних прийомах варіаційного аналізу і регресії. Серед них: класифікації з використанням зовнішньої інформації; поліноміальну регресію з геометричними координатами; регресійні моделі.

Класифікаційні методи використовують досягнути інформацію (таку, як ґрунтові типи або адміністративні території) для поділу досліджуваної території на регіони, які можуть бути охарактеризовані статистичними моментами (середнім, дисперсією) атрибутів, виміряних у точках, розміщених у межах цих регіонів.

Поліноміальні інтерполятори відображають значення у точці у вигляді поліному від координат. В двовимірному випадку – для точки x з координатами (x, y) $Z^*(x, y) = P_n(x, y)$, де P_n – поліном n -го ступеня. Зазвичай на практиці для двовимірного випадку використовують один з чотирьох типів поліномів:

- площина: $P_1(x, y) = a + bx + cy$;
- білінійно-сідловий: $P_{1.5}(x, y) = a + bx + cy + dxy$;
- квадратичний: $P_2(x, y) = a + bx + cy + dxy + ex^2 + fy^2$;

- кубічний: $P_3(x, y) = a + bx + cy + dxy + ex^2 + fy^2 + gx^2y + hxy^2 + ix^3 + jy^3$.

Теоретично можна використовувати і поліноми більш високого порядку. Вони визначаються максимальним ступенем при x , максимальним ступенем при y і спільним максимальним ступенем. Всі проміжні ступені в поліноми будуть присутні.

Таким чином, горизонтальна поверхня має порядок нуль, похила плоска поверхня – перший порядок, квадратична поверхня – другий порядок, кубічна поверхня з десятьма коефіцієнтами має третій порядок. Знаходження коефіцієнтів a_i є стандартною процедурою в задачах на множинну регресію і легко обчислюються за допомогою стандартних статистичних пакетів. Після знаходження коефіцієнтів a_i трендова поверхня може бути відображена оцінкою значень $Z(x, y)$ у всіх точках регулярної мережі. Порядок трендової поверхні P з формальної точки зору може бути скільки завгодно великим. Збільшення порядку полінома, як правило, призводить до збільшення ступеня його відповідності реальній поверхні. Проте при цьому, з одного боку, втрачається фізичне значення побудови, з іншого – різко збільшуються вимоги до обсягу даних, необхідних для знаходження коефіцієнтів a_i .

Завдання поліноміальної інтерполяції зводиться до того, щоб визначити невідомі коефіцієнти a_i , так, щоб поліноми максимально добре відповідали даним в заданих точках. Для цього знаходять мінімум по всіх коефіцієнтах $(a, b, c, d$ і т. д.) функції χ^2 , яка задає інтегральну помилку інтерполяції та обумовлена наступним чином:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N [Z(x_i, y_i) - P_n(x_i, y_i)]^2 \quad (1)$$

Мінімізація полягає у вирішенні системи лінійних рівнянь з числом невідомих, що дорівнює кількості рівнянь. Число рівнянь (невідомих) залежить від обраного полінома.

Глобальний поліноміальний метод не є інтерполятором в строгому сенсі, скоріше він відноситься до апроксиматорів. Його можна використовувати для виділення великомасштабного тренда.

Можна скористатися і локальним варіантом поліноміального методу, коли пошук коефіцієнтів проводиться тільки на основі даних, які потрапили в зону пошуку.

6. Система оцінювання сталого розвитку. Методологія оцінювання та аналізу сталого розвитку, яка викладена в роботах [1,2] і використовується в цьому дослідженні, включає модель сталого розвитку, яка є міждисциплінарним узагальненням моделей, відомих в природничих, економічних та соціальних галузях науки, та методику застосування формальних статистичних методів та методів експертного оцінювання для аналізу процесів сталого розвитку.

$$\{Q\} = j w_{sl} C_{sl} + w_{ql} \overline{C_{ql}}(I_{ec}, I_e, I_s). \quad (2)$$

Кватеріон $\{Q\}$ містить уявну зважену скалярну частину $j w_{sl} C_{sl}$, яка описує безпеку життя людей і зважену дійсну векторну частину, яка описує якість життя людей у просторі трьох вимірів: економічного (I_e), екологічного (I_{ec}) і соціально-інституціонального (I_s). Вагові коефіцієнти w_{sl} і w_{ql} в формулі (2) використані з метою вирівнювання масштабів компонент безпеки і якості життя.

З метою кількісного оцінювання вимірів сталого розвитку використаємо принципи побудови ієрархічної системи показників та індексів, які визначаються як L_1 -норми:

$$I_i = \sum_{j=1}^n w_j x_{i,j}, i = \overline{1, m}, \sum_{j=1}^n w_j = 1 \quad (3)$$

в просторі показників $X^1 \times X^2 \times \dots \times X^m$, що характеризують економічний, екологічний та

соціально-інституціональний розвиток кожного i -ого регіону. Вагові коефіцієнти w_j в формулі визначаються експертним шляхом.

Значення компоненти безпеки життя C_{sl} для j -ого регіона визначається як норма Мінковського вектора $\vec{S}_j = (s_i^j)$, $s_i^j = 1 - t_i^j$, $i = \overline{1, n}$:

$$C_{sl} = \|\vec{S}_j\| = \left(\sum_{i=1}^n (s_i^j)^p \right)^{1/p} \quad (4)$$

з параметром $p = 3$.

7. Аналіз трендових поверхонь. Для проведення дослідження було використано набір даних, який описує сталий розвиток України в 2013 році Світового центру даних з геоінформатики та сталого розвитку [1]. З метою перевірки гіпотези про існування просторового тренду в розподілі даних про сталий розвиток було використано спочатку картографічний метод, який дозволяє оцінити загальний паттерн просторового розподілу значень. З цією метою було побудовано ряд тематичних карт значень індексу сталого розвитку та його складових за областями на основі поділу на п'ять груп за природними межами класифікації значень. Аналіз карт дозволяє стверджувати про наявність певної зміни у розподілі значення індексу сталого розвитку у географічному просторі. Для підтвердження цього припущення було використано метод побудови поліноміальної трендової поверхні, яка була побудована на основі точкового файлу, який містить дані про геометричні центри областей України. В результаті проведення експериментальних побудов поверхонь було з'ясовано, що практичне значення при виявленні трендів у даних мають поверхні утворені поліномами 1 – 3 ступенів. Якщо поліноми першого ступеня допомагають встановити загальні характеристики тренду даних, то поліноми 2 – 3 ступенів дозволяють підтвердити існування просторової тенденції у даних та визначити загальні риси її розподілу.

Аналіз поліноміальної поверхні 1, 2 порядків для індексу сталого розвитку дозволяє впевнено стверджувати про існування географічного тренду в розподілі індексу. Значення індексу мають загальну тенденцію до зменшення з Північного Заходу на Південний Схід. Звичайно, в цьому розподілі даних існують відхилення, які пов'язані, наприклад, з високим значенням індексу сталого розвитку для м. Київ, але вони тільки підкреслюють наявність певного географічного тренду (рис.4).

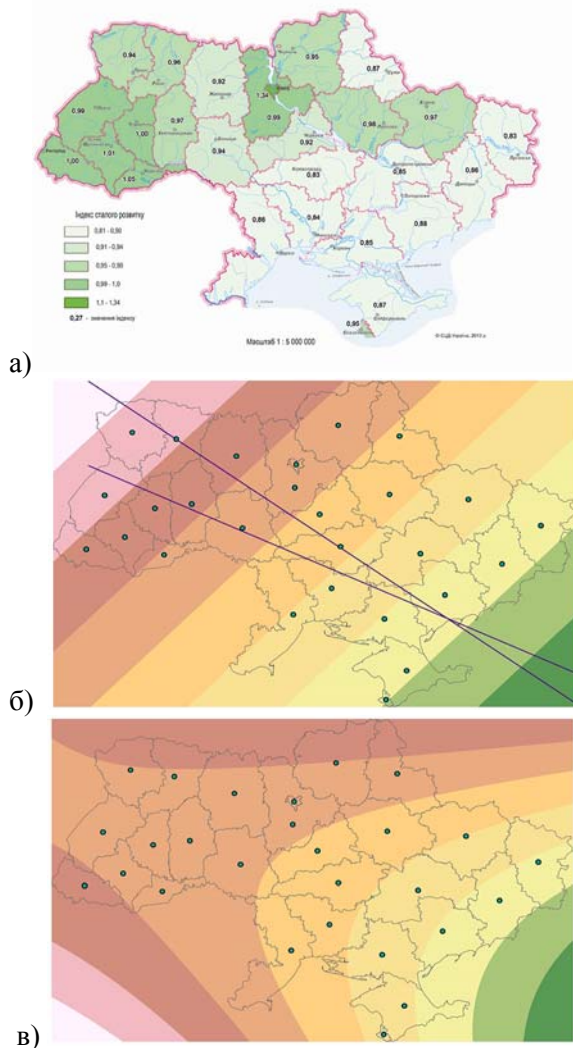


Рис.4. Розподіл трендових моделей для індексу сталого розвитку: а - картограма за регіонами; б - поліном 1 порядку; в - поліном 2 порядку.

Допоміжним інструментом аналізу тренду є графік аналізу тренду, який у площинах північ – південь, захід – схід демонструє наявність трендів у розподілі даних, які у вигляді результуючого тренду визначаються на трендовій поверхні (рис.5). Таким чином, можна зробити припущення, що західні області мають тенденцію до більш сталого розвитку, ніж області сходу.

Трендові поверхні можуть бути оцінені як за допомогою значень коефіцієнтів, які використовувались у поліномі, так і описом фізичних характеристик трендової поверхні. Такими характеристиками є ухил поверхні, кут між лініями скату поверхонь першого та другого поліномів, експозиція схилів. Кути нахилу прямо пропорційно та кути між лініями скату обернено пропорційно вказують на наявність вираженого тренду в даних. Кореляційний аналіз між цими показниками вказує на існування тісного зв'язку, який за індексом кореляції Пірсона дорівнює 0,816.

Додатковими інструментами аналізу можуть виступати локальні методи інтерполяції даних, такі як обернено-зважені відстані та розподіл ухилів отриманих статистичних поверхонь.

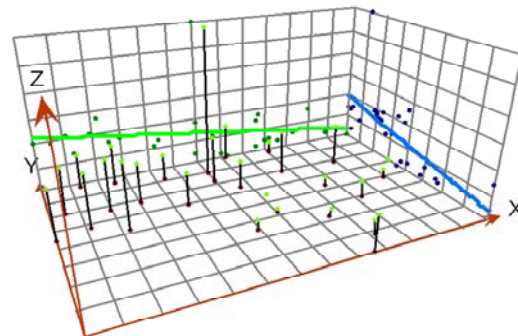


Рис.5. Графік аналізу трендової поверхні індексу сталого розвитку

Висновки. Інтелектуальний аналіз геопросторових даних є перспективним напрямом наукових досліджень на перетині геоінформатики, методів Data Mining та статистичних методів обробки даних із широким залученням методології системного аналізу. Основною метою використання ІАГД є пошук закономірностей та відносин у великих масивах даних, які містять просторово координовану прив'язку. Тому використання ІАГД в складі СППР в територіальному управлінні та прогнозуванні є важливим та актуальним інструментом обґрунтування управлінських рішень. Процес реалізації ІАГД відрізняється стадійністю та ітераційністю з метою пошуку оптимальних результатів аналізу.

Прикладне значення трендового аналізу полягає у можливості виявлення просторових закономірностей у розподілі даних та встановлення загального закону їх розподілу. Експериментальне застосування моделей трендового аналізу для ієрархічної математичної моделі сталого розвитку регіонів України довело доцільність застосування геопросторових трендів при аналізі комплексних соціальних, економічних та екологічних явищ. Визначено доцільність застосування для виявлення просторових тенденцій трендових поверхонь 1-3 порядків. Специфіка застосування трендових поверхонь при аналізі геопросторових даних полягає у можливості використання додаткових методів аналізу отриманих поверхонь на основі загально-прийнятих картометричних методів визначення куту нахилу поверхонь та експозиції схилів.

Трендовий аналіз даних дозволив встановити наявність загального тренду у розподілі показників індексу сталого розвитку на території України, який в подальшому може бути розкладений за складовими ієрархічної моделі.

Список використаних джерел

1. Аналіз сталого розвитку: глобальний і регіональний контексти: монографія / Міжнар. рада з науки (ICSU) та ін.; наук. кер. проекту М.З. Згуровський /М.З. Згуровський, О.А. Акімова, А.О. Болдак, П.Л. Вавулін, І.М. Джигирей, К.В. Єфремов, В.В. Путренко. – К. : НТУУ «КПІ», 2014. – Ч.2. Україна в індикаторах сталого розвитку (2013). – 172 с.
2. Згуровський М.З. Интеллектуальный анализ и системное согласование научных данных в междисциплинарных исследованиях / М.З.Згуровський, А.О.Болдак, К.В.Єфремов // Кибернетика и системный анализ. – 2013. – № 4. – С. 62-75.
3. Згуровський М. Системний аналіз: Проблеми, методологія, приложения. / М.Згуровський, Н.Панкратова. – К.: Наук. думка, 2005. — 743 с.
4. Петренко А.І. Grid та інтелектуальна обробка даних Data Mining / А.І. Петренко // Систем. дослідж. та інформ. технології. — 2008. — № 4. — С. 97-110.
5. Черняк О.І. Інтелектуальний аналіз даних: Підручник / О.І. Черняк, П.В. Захарченко ; Київ. нац. ун-т ім. Т. Шевченка. — К. : Знання, 2014. — 599 с.
6. Andrienko G. Data mining with C4.5 and interactive cartographic visualization / G. Andrienko, N. Andrienko // In N. W. G. T. Paton (Ed.), User interfaces to data intensive systems. Los Alamitos, CA: IEEE Computer Society. – 1999. – pp. 162–165.
7. Cleve C. Classification of the wildland–urban interface: A comparison of pixel- and object-based classifications using high-resolution aerial photography / C. Cleve, M. Kelly, F. R. Kearns, M. Morltz // Computers Environment and Urban Systems, 32(4). – 2008. – pp. 317–326.
8. Guo D. Multivariate analysis and geovisualization with an integrated geographic knowledge discovery approach / D. Guo, M. Gahegan, A. M. MacEachren, B. Zhou // Cartography and Geographic Information Science, 32(2). – pp. 113–132.
9. Han J. Spatial clustering methods in data mining: A survey/J.Han, M.Kamber, A.K.H. Tung. // In H. J. Miller & J. Han (Eds.). – Geographic data mining and knowledge discovery. London and New York: Taylor and Francis. – 2001. – pp. 33–50

References

1. Analysis of Sustainable Development: Global and Regional Contexts: Monography (2014) / Int. Science Council (ICSU), etc.; sciences manager Project M.Z. Zgurovsky - Kyiv NTUU "KPI" - Part 2. Ukraine in the Indicators of Sustainable Development (2013). - 172 p.
2. ZGUROVSKY M.Z., BOLDAK A.O., EFREMOV K.V. (2013) Intellectual analysis and systematic coordination of scientific data in interdisciplinary studies // Cybernetics and system analysis. No. 4. P. 62-75.
3. ZGUROVSKY M., PANKRATOVA N. (2005) System analysis: Problems, methodology, applications. - Kyiv: Science. Opinion.
4. PETRENKO A.I. (2008) Grid and Intelligent Data Mining // Systems. research and inform technology. No. 4. P. 97-110.
5. CHERNYAK O.I., ZAHARCHENKO P.V. (2014) Intellictual data analysis. - Kyiv.: Knowledge, 599 p.
6. ANDRIENKO G. (1999) Data mining with C4.5 and interactive cartographic visualization // In N. W. G. T. Paton (Ed.), User interfaces to data intensive systems. Los Alamitos, CA: IEEE Computer Society. pp. 162–165.
7. CLEVE C. KELLY M., KEARNS F. R., MORLTZ M. (2008) Classification of the wildland–urban interface: A comparison of pixel- and object-based classifications using high-resolution aerial photography // Computers Environment and Urban Systems, 32(4). pp. 317–326.
8. GUO D., GAHEGAN M., MACEACHREN A. M., ZHOU B. (2005) Multivariate analysis and geovisualization with an integrated geographic knowledge discovery approach / D. Guo, // Cartography and Geographic Information Science, 32(2). – pp. 113–132.
9. HAN J., KAMBER M., TUNG A. K. H. (2001) Spatial clustering methods in data mining: A survey / In H. J. Miller & J. Han (Eds.). – Geographic data mining and knowledge discovery. London and New York: Taylor and Francis. pp. 33–50.

Надійшла до редколегії 13.03.2017

УДК 004.932.2

Рудницький А.В., студент;
Кобзар А.Ю., к.т.н., м.н.с.

**Програмно-апаратний комплекс для
автоматичної побудови панорамних знімків**

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр.-т.
Глушкова, 4д,

e-mail: Andrey4ru@gmail.com,
taras55@gmail.com

A. Rudnitskiy, student;
A. Kobzar, PhD, Junior researcher

**Programmatic-hardware complex for automatic
panoramic images building**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova av., 4d,

e-mail: Andrey4ru@gmail.com,
taras55@gmail.com

В роботі розглядається повністю автоматизований метод побудови панорамних зображень, що передбачає мінімальне втручання оператора. Розроблено апаратний комплекс на базі платформи Ардуіно, призначений для автоматичної панорамної зйомки шляхом зміни положення камери у просторі. Реалізовано робочий прототип, що демонструє роботу запропонованого методу. Використання автоматизованого комплексу дозволяє покращити якість та уникнути певних спотворень, пов'язаних зі зміщенням камери у просторі. Адаптовано програмно-алгоритмічний комплекс для побудови панорамних знімків в режимі реального часу для використання з розробленим пристроєм. В роботі описано два основних етапи побудови панорамного зображення. На першому етапі відбувається пошук взаємного положення зображень за допомогою алгоритму співставлення границь. Під час другого етапу виконується об'єднання знімків в панорамне зображення на основі алгоритму багатосмугового змішування. Використані алгоритми оптимальні для поставленої задачі та забезпечують стійкий результат.

Ключові слова: панорамні знімки, обробка зображень, реєстрація зображень, Ардуіно.

The paper considers a fully automated method for producing a panorama by image stitching, which involves minimal operator intervention. During the research, we have developed and tested a hardware complex based on the Arduino platform. It is designed for automatic shooting of panoramic images by changing the position of the camera in space. As a proof of concept, we implemented a working prototype that demonstrates that the proposed method obtains high-quality results. The use of the automated system allows to improve the quality and avoid certain distortions associated with the displacement of the camera in space. Proposed algorithm for real-time image stitching was adapted for being used on the developed device. The paper describes two basic steps in constructing a panoramic image. At the first stage, the edge detection algorithm is used for determining pairwise positional relationships between captured images. During the second stage, the stitching of images into a panoramic image is performed based on the multiband blending algorithm. The used algorithms are optimal for a given task and provide a stable result.

Key Words: panoramic shots, image processing image searching, Arduino.

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

Вступ

Найбільш новаторською та перспективною сферою діяльності в інформаційних технологіях на сьогоднішній день являється віртуальна реальність. Процес переведення реального простору у віртуальний має дуже багато сфер застосування, таких як: екскурсії різними

місцями на планеті, продаж або здача в оренду нерухомості та інше.

Однією з технологій, які дозволяють це робити є панорамні знімки. Методи їх побудови, які частіше всього використовуються сьогодні, передбачають велику кількість ручної роботи як

на етапі зйомки так і під час обробки, що робить цей процес довгим та виснажливим.

В роботі представлено програмно-апаратний комплекс, який дозволяє повністю автоматизувати процес панорамної зйомки. Це відбувається завдяки пристрою, який дозволяє спрямувати об'єктив камери в довільному напрямку та програмному забезпеченню, яке керує пристроєм та здійснює обробку отриманих зображень.

Програмне об'єднання різних зображень здійснюється завдяки алгоритму, який співставляє стійкі границі об'єктів на них, для отримання найбільшої кількості співпадінь.

Апаратний комплекс

Для повної автоматизації процесу побудови панорамного знімку та уникнення збурень, пов'язаних зі зміною положення камери у просторі, запропоновано апаратний комплекс на базі Arduino – платформи з відкритим програмним кодом. Було розроблено прилад, призначений для автоматичної зміни положення камери у просторі за заданою траєкторією.

При побудові повного панорамного знімку виникає необхідність повороту камери в двох площинах.

Для повороту камери в горизонтальній площині запропоновано використовувати кроковий двигун, оскільки він забезпечує обертання ротора на заданий кут при відповідному сигналі керування. З конструктивної точки зору це забезпечується за рахунок подачі живлення на різні котушки всередині двигуна в певній послідовності. Двигун моделі 28BY J-48 виконує поворот на 360° за 4096 кроків, що відповідає $0,09^\circ$ за один крок. Для керування кроковим двигуном використовується драйвер на базі мікросхеми ULN2004 з індикацією активних котушок.

Для повороту камери у вертикальній площині доцільно використовувати серводвигун-привід із керуванням через від'ємний зворотній зв'язок, що дозволяє точно керувати параметрами руху. Зазвичай кут обертання валу двигунів такого типу не більше ніж 180° , у нашому випадку цього достатньо.

На рисунку 1 зображено схему підключення живлення та всіх пристроїв необхідних для функціонування пристрою.

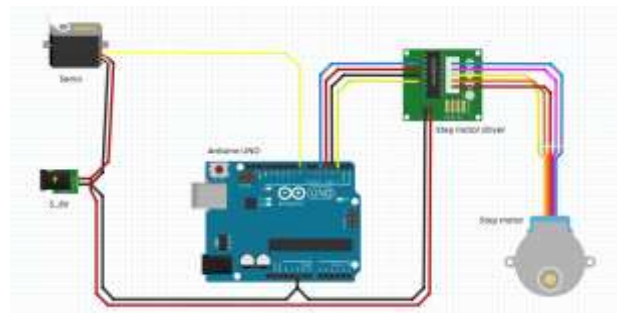


Рис. 1 Схема підключення модулів та живлення

Зазначені деталі було закріплено на алюмінієвий каркас, що забезпечило меншу масу виробу. Дана конструкція надає можливість корегувати положення мобільного пристрою, що необхідно для покращення якості панорамного знімку та передбачає використання різних смартфонів із встановленим на нього програмним забезпеченням.

Розроблений прилад фіксується на штативі для уникнення зміни положення камери у просторі, що дає змогу покращити якість вихідного зображення. Мобільний прилад розташовується так, щоб об'єктив знаходився в центрі координатних осей. В якості джерела живлення запропоновано використовувати батарею типу «крона».

Керування апаратним комплексом, зображеним на рисунку 2, виконується безпосередньо з мобільного пристрою через USB інтерфейс.



Рис. 2 Апаратний комплекс для автоматичної зміни положення камери у просторі

Виділення стабільних границь

У рамках роботи було використано алгоритм виділення границь, запропонований в [1], оскільки він характерний своєю швидкістю та стійкістю до афінних перетворень. Стійкість, в свою чергу, гарантує повторюваність: на зображеннях одного й того ж об'єкта або сцени, зроблених із різних положень камери, при різному освітленні, масштабі, більшість відповідей буде знайдено.

Робота алгоритму розпочинається із переведення кольорового зображення у відтінки сірого за формулою:

$$y = \left[\frac{77R + 150G + 29B}{256} \right],$$

де y – яскравість пікселя у відтінках сірого, R , G , B – насиченість відповідного кольорового каналу.

Для ефективнішого виділення границь та зменшення впливу шумів вхідне зображення розмивається за допомогою фільтра гауса (відомого як “Gaussian blur” [2]) з параметром $\sigma = 3$. Нехай вхідне зображення задане інтенсивністю $I(x, y)$, гаусове ядро з параметром σ розраховується як:

$$G(x, y, \sigma) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \sum_{u,v} e^{-\frac{(u^2+v^2)}{2\sigma^2}},$$

де u, v – границі сумування, які визначають розмір ядра. Нове значення інтенсивності кожного пікселя розраховується як згортка ядра гауса з зображенням.

Для кожного пікселя зображення виконується пошук векторів градієнтів $\text{grad } I = \left(\frac{\partial I}{\partial x}, \frac{\partial I}{\partial y} \right)$ за допомогою дискретного оператора вигляду:

$$G_y = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, G_x = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

На основі цієї інформації здійснюється виділення границь, оскільки на ній досягається локальний максимум суми проекцій градієнтів точок околу на напрямок градієнта в точці цієї границі.

Далі всі пікселі класифікуються на ті, що лежать близько до границі та далеко від неї. Пікселі, що лежать біля границі поділяються на ті, що лежать перед нею (за напрямком її градієнту) та позаду неї. Для кожної точки зображення вводиться система координат, напрямок осі абсцис якої відповідає напрямку

вектора градієнта, а вісь ординат перпендикулярна до неї.

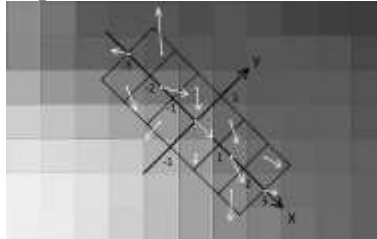


Рис. 3 Система координат для точки

Нова система координат розділяється на шість блоків з діапазоном значень $[-3, -2]$, $[-2, -1]$, $[-1, 0]$, $[0, 1]$, $[1, 2]$, $[2, 3]$ по x , та $[-1, 1]$ по y . Кожному блоку ставиться у відповідність значення $V_i, i=1..6$, яке на початку береться рівним 0.

Градієнти всіх точок (x_0, y_0) , центри яких потрапляють до прямокутного околу $[-3, 3] \times [-1, 1]$ точки яка розглядається, проєктуються на вісь абсцис. Величину проєкції домножують на $1 - |y_0|$, позначимо цю величину як P'_0 , та додають до елементів V так, щоб вклад в V_i елемент був рівний:

$$P''_0 = P'_0 \max\{0, 1 - |x_0 - x_i|\}.$$

На основі аналізу V_i робиться припущення про положення точки відносно границі. Серед значень обирається максимальне: якщо максимуму відповідає V_2, V_3 – точка лежить перед границею (якщо дивитись в напрямку її градієнта), якщо V_4, V_5 – за границею. У випадку коли максимальним є значення V_1, V_6 – точка визначається як та, що лежить далеко від границі і в подальшому не розглядається.

Для знаходження положення границі з субпіксельною точністю координати точок близьких до границі уточнюються. Значення V_i об'єднуються:

$$A_i = V_{2i-1} + V_{2i}, i = 1, \dots, 3.$$

Нове положення точки знаходиться як екстремум квадратичного тричлена:

$$(x', y') = (x, y) + \frac{A_1 - A_3}{A_1 - 2A_2 + A_3} (G_x(x, y), G_y(x, y)).$$

Точки які знаходяться на відстані меншій ніж 0,5 пікселя одна від одної об'єднуються в одну.

Вважаємо, що границя зображення проходить в тих місцях, де дотикаються точки, які

знаходяться перед границею та позаду неї. Далі для кожної точки знаходимо дві сусідні, відстані до яких мінімальні та не перевищують 2 пікселя. Для побудови більш прямих ліній границі вводиться ще один критерій: кут між прямими, що з'єднують точку з її сусідами, повинен бути максимально великим та не меншим ніж 120° .

Лінія границі являє собою граф, що складається зі зв'язаних між собою сусідніх точок. Кожна вершина може мати не більше ніж 2 зв'язки, що відповідає нерозгалуженій границі. Лінії, які складаються менше ніж з 5 вершин, вважаємо нестабільними і виключаємо з розгляду.

На заключному етапі роботи алгоритму для кожної точки з лінії границі розраховується вектор нормалі, який визначається як перпендикуляр до прямої, що з'єднує сусідні точки. У випадку коли точці відповідає лише один сусід, в якості другого сусіда обирається точка яка розглядається. Напрямок перпендикуляра обирається такий, що утворює менший кут з вектором градієнта найближчої сусідньої точки.

Пошук зміщення зображень

Основною ідеєю підходу, запропонованого в [3], є оптимізація процедури побудови панорамних знімків за допомогою даних із датчика прискорення. Пошук знаходження положення знімків в системі координат зображень зводиться до знаходження трьох невідомих кутів Ейлера. Датчик прискорення – це пристрій, який вимірює напрям та силу прискорення, що діє на нього. На основі цього датчика розраховуються два невідомі кути Ейлера.

Робота алгоритму зводиться до пошуку такого кута повороту α навколо вертикальної осі, при якому множини границь зображення I_1 , положення якого відоме, та зображення I_2 , положення якого шукається, максимально співпадають.

Як результат роботи алгоритму виділення стабільних границь було отримано множину точок об'єднаних в лінії та вектори нормалі кожної точки. Пошук невідомого кута ведеться за допомогою гістограми, яка відображає суму розмірів границь що співпадають при певному куті α . Спочатку простір розбивається на горизонтальні смуги, для зручності висота смуги береться в 1 піксель та в подальшому

розглядається декілька сусідніх смуг об'єднаних в одну. У випадку коли значення невідомого кута необхідно уточнити, для скорочення кількості обчислень горизонтальні смуги розбиваються на сегменти.

Перераховується положення точок та їх векторів нормалей обох зображень, в залежності від їх положення у просторі. Значення невідомого кута для зображення I_2 встановлюється рівним нулю. Розраховується кут повороту всіх точок (x, y, z) навколо вертикальної осі.

Ключовий аспект роботи алгоритму – заповнення гістограми. Спочатку необхідно знайти номери, до яких відносяться точки (x, y, z) з зображення I_1 . Для цього скористаємося формулою:

$$m = \min \left\{ N - 1, \left\lceil \left(\frac{\arcsin(\varphi)}{\pi} + 0,5 \right) + N \right\rceil \right\},$$

де N – кількість горизонтальних смуг.

Послідовно опрацьовуються всі точки зображення I_2 , для кожної розраховується номер смуги до якої вона належить. Точки зображення I_1 , що знаходяться в тій же смузі, порівнюються з поточною та при умові, що кут між векторами нормалей не більший ніж 90° . Під порівнянням розуміємо процес пошуку невідомого кута γ повороту навколо вертикальної осі при якому точки співпадають. Елемент гістограми, який відповідає куту γ , збільшується на мінімум величин градієнтів двох точок, що порівнюються, помножений на квадрат косинуса їх нормалей.

В залежності від кута повороту зображення навколо вертикальної осі площа перетину зображень може відрізнитись. В результаті може виникнути ситуація, що при малій площі перетину зображень кількість спільних точок границі може бути меншою ніж хибно визначених при великій. Для того, щоб це уникнути всі елементи гістограми діляться на площу перетину зображень при відповідному куті. З розгляду вилучаються елементи діаграми, що відповідають куту при якому площа перетину порівнюваних зображень занадто мала. Для зменшення впливу шумів та неточності датчика прискорення елементи гістограми згладжуються гаусіаном.

Шуканий кут повороту α навколо вертикальної осі відповідає максимальному елементу гістограми.

Нехай $\bar{z}$ – середнє значення елементів гістограми, $\tilde{z}$ – локальний максимум відмінний від глобального, $\hat{z}$ – глобальний максимум. Якщо існує таке $\tilde{z}$, при якому виконується:

$$|\bar{z} - \tilde{z}| > \frac{1}{3} |\bar{z} - \hat{z}|,$$

то вважаємо, що результат не стійкий і невідомий кут знайти неможливо.

Даний підхід також доцільно використовувати для уточнення уже відомих кутів з метою збільшення точності обчислень.

Об'єднання зображень

На останньому етапі всі фрагменти об'єднуються в один панорамний знімок із використанням сферичної проекції.

Найбільш широко вживаний підхід для об'єднання знімків – це multi-band blending [4]. Будується піраміда Лапласа, зображення лінійно комбінуються на кожному з рівнів. Фінальний результат отримується шляхом додавання всіх змішаних зображень із різних рівнів.

Основна проблема на даному етапі полягає в тому, що границі зшивання досить помітні через перепади яскравості. Для усунення різких перепадів на границях робиться припущення, що зміна яскравості має лінійний характер. Тоді коефіцієнт яскравості k_i для кожного фрагменту знаходиться як розв'язок оптимізаційної задачі:

$$\sum_{i,j=1}^n S_{ij} (k_i c_{ij} - k_j c_{ji})^2 \rightarrow \min$$

з обмеженнями:

$$\sum_{i=1}^n k_i = n.$$

Проблему різких переходів на границях підхід повністю не вирішує, оскільки на зображеннях присутні нелінійні зміни кольорів.

Висновок

Побудова панорамних зображень – це актуальна тематика як для професійних фотографів так і для любителів. В даній роботі описаний один з методів автоматичної побудови панорамних зображень, що потребує мінімального втручання оператора. Для досягнення максимальної автоматизації було реалізовано програмно-апаратний комплекс, призначений для автоматичної зміни положення камери у просторі.

Запропонований програмно-алгоритмічний підхід характерний високою результуючою якістю вихідного зображення та швидкодією, в сукупності з апаратною частиною забезпечує покращення якості за рахунок уникнення збурень пов'язаних зі зміщенням камери у просторі

Список використаних джерел

1. Гаращенко Ф.Г. Сопоставление снимков панорамы на основании границ объектов / Гаращенко Ф.Г., Кобзарь А.Ю. // Компьютерная математика. - 2014. - №1. - С. 46-53.
2. Gaussian blur [Електронний ресурс] // Wikipedia – Режим доступу до ресурсу: http://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_blur
3. Verchenko A. About one of the algorithms of panoramic images building / Verchenko A., Kobzar A. // Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kiev. Series: Physics & Mathematics. – 2011. -№3. – P.109–114.
4. Burt P. A multiresolution spline with application to image mosaics / P. Burt, E. Adelson // ACM Transactions on Graphics. - 1983. - Vol. 2, Issue 4. - P. 217-236.

References

1. Garashchenko F.G., Kobzar A.U. (2014) Edge based image matching approach for image stitching, *Computer mathematics.*, N1., pp. 46-53.
2. Gaussian blur [Digital resource], Wikipedia – Resource access mode: http://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_blur
3. Verchenko A.P., Kobzar A.U. (2011) About one of the algorithms of panoramic images building, *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kiev. Series: Physics & Mathematics.*, № 3., pp.109–114.
4. Burt P., E. Adelson (1983) A multiresolution spline with application to image mosaics, *ACM Transactions on Graphics.*, vol. 2, issue 4, pp. 217-236.

УДК 004.588

Ставровський А. Б., к.ф.-м.н., доцент
Ніщик О. В., студент

Навчальна система для відображення та обчислення опору ділянки електричного кола

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03127, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4д,
e-mail: kafedraTK@unicyb.kiev.ua

A. B. Stavrovskiy, Assoc.prof.
O. V. Nishchik, student

Educational system for displaying and calculating the resistance of the electric circuit

Taras Shevchenko National University of
Kyiv, 03127, Kyiv, Glushkov ave., 4d,
e-mail: kafedraTK@unicyb.kiev.ua

Об'єктом роботи є процес розв'язування задач на визначення опору електричного кола. Розглянуто особливості алгоритмів розрахунку електричного опору. Вказано на переваги та недоліки використання електронних засобів у процесі навчання. Представлено програмний засіб, що надає можливість відображення та обчислення опору ділянки електричного кола. Запропоновано рекомендації з використання та впровадження програмного засобу.

Ключові слова: програмний засіб, схема електричного кола, опір ділянки електричного кола.

In this paper, the process of solving tasks for determining the resistance of an electric circuit is investigated. Peculiarities of algorithms for calculating electric resistance are considered. The advantages and disadvantages of using electronic means in the process of education are described. A software tool is represented that provides the ability to display and calculate the resistance of the electric circuit. It is also possible to show a step-by-step simplification of the electric circuit, which gives a clear idea and representation of the calculation and reduction of the circuit. On the basis of the created model, using the object-oriented programming language tools to develop a software product (computer model) with a user-friendly interface, high speed and ease of work with the possibility of its practical use in the study of physics in general education institutions. The Java programming language was used to perform the work. The algorithms for qualitative construction of geometric structures, which is an electric circuit and for simplification of the scheme, were applied. This work is suggested recommendations on the use and implementation of the software.

Keywords: software tool, electrical circuit, resistance to the electric circuit.

Статтю представив д.т.н., проф. Заславський В. А.

1. Вступ та постановка задачі

Сучасна фізика як навчальний предмет здатна своїм змістом формувати особистість для повноцінного життя, але одночасно фізична освіта вимагає відповідального ставлення педагога до організації навчального процесу. Інформаційні технології навчання передбачають широке використання комп'ютерної техніки та спеціального програмного забезпечення як потужного засобу навчання фізики.

Проблемами впровадження інформаційних технологій у навчальний процес з фізики займалися О. І. Бугайов, Є. Коршак, В. Заболотний, Ю. Жук, О. Ляшенко, Н. Сосницька та ін. У працях цих вчених розглядаються питання удосконалення шкільного

фізичного експерименту засобами інформаційних технологій, відпрацьовані окремі аспекти використання в навчальному процесі з фізики моделювальних програм, комп'ютерних ігор та проєктів. Пріоритетність комп'ютерно-орієнтованих технологій у формуванні компетентностей учнів у процесі навчання фізики доводив М. В. Головка [1]. Тому актуальним є створення засобів, які за допомогою експериментальних задач забезпечують оволодіння повноцінними вміннями.

Одним з таких засобів може бути програмна система для розрахунку опору ділянки електричного кола, яка також ілюструє

покрокове спрощення ділянки електричного кола для правильного розрахунку опору.

На основі створеної математичної моделі було розроблено програмний продукт (комп'ютерну модель) для практичного використання при вивченні фізики в загальноосвітніх навчальних закладах.

2. Переваги та недоліки використання електронних засобів в процесі навчання

Електронні засоби навчання дозволяють моделювати ситуації, що не реалізуються експериментально в шкільному кабінеті фізики (наприклад, роботу ядерної установки). В [2] відзначають такі переваги електронних засобів навчання: можливість здійснення дистанційного навчання; невеликі матеріальні затрати; легкість модифікації, оновлення, доповнення; дослідження поведінки фізичного об'єкта за значно коротший час при довільних значеннях його параметрів, у різних зовнішніх умовах, що часто при реальному дослідженні є просто неможливим або надто дорогим.

Поряд з тим, використання моделюючих систем при вивченні шкільного курсу фізики має ряд недоліків. Зокрема, учні перестають розгорнуто відповідати на запитання, відповідають стисло й лаконічно, програма не спроможна пояснити учню матеріал іншими (доступнішими) словами та методами, тому при проведенні уроків необхідно комбінувати використання програмних засобів із іншими формами навчальної діяльності. До недоліків також відносять неможливість набуття практичних навичок проведення реального фізичного експерименту, роботи з вимірювальними приладами, відповідність лише з певною точністю результатів моделювання експериментальним.

3. Розрахунок опору електричного кола

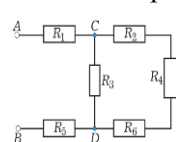
В електричних колах, з якими можна зустрітися на практиці, провідники з'єднуються в різні способи.

Для впевненого розв'язання задач на визначення загального опору електричного кола важливо вміти в складних схемах розпізнавати провідники, з'єднані послідовно або паралельно [3].

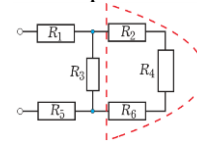
Для прикладу, при визначенні загального опору кола, схема якого зображена на мал. 1, можна виділити три послідовно з'єднаних провідника R_2 , R_4 і R_6 (мал. 2).

На еквівалентній схемі (мал. 3) їх можна замінити одним провідником опором $R_{246} = R_2 +$

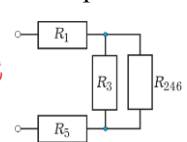
$R_4 + R_6$. Тепер видно, що провідник опором R_{246} з'єднаний паралельно з провідником опором R_3 .



Мал. 1

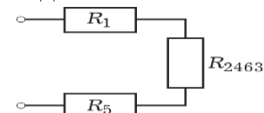


Мал. 2



Мал. 3

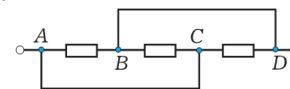
На еквівалентній схемі (мал. 4) видно, що зникли вузли між провідниками R_1 , R_{2463} і R_5 , тому ці провідники виявилися з'єднаними послідовно.



Мал. 4

Перетворюючи коло до більш простого еквівалентного, можна на схемах згинати, подовжувати або вкорочувати проводи, переміщати вузли вздовж них, оскільки проводи, що сполучають елементи схеми, вважаються ідеальними, тобто мають нульовий опір.

Коло, що складається з трьох послідовно з'єднаних провідників з однаковим опором, зміниться, якщо додати інші провідники. Спочатку додамо два провідники з нульовим опором, з'єднавши ними точку A з точкою C, а B – з D (мал. 5).

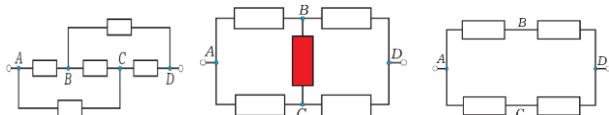


Мал. 5

Так як точки A і C з'єднані проводом з нульовим опором, то їх потенціали рівні, а значить, ці точки мають однаковий потенціал, і їх можна зібрати в один загальний вузол. Аналогічно чинимо з точками B і D. Отже, кожен провідник виявився підключеним до одних і тих же точок, тобто всі три провідники з'єднані паралельно, і можна знайти загальний опір кола.

Замінивши другий ідеальний провідник в колі, схема якого показана на мал. 5, реальним, отримаємо нове коло, схема якого зображена на мал. 6. Тут важко виявити хоча б одну пару послідовно або паралельно з'єднаних провідників. Потрібно модифікувати схему так, щоб можна було побачити в ній елементи симетрії. Отримаємо схему, яка носить назву «мостова схема» (мал. 7).

Оскільки всі провідники мають однаковий опір, то по гілках ABD і ACD течуть однакові струми, а через виділену перемичку BC струм йти не буде. Тому перемичку можна безболісно видалити з кола, не змінивши при цьому загальний опір кола (мал. 8).



Мал. 2

Мал. 3

Мал. 4

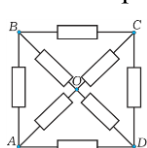
Тепер видно, що коло складається з двох паралельно з'єднаних ділянок, в яких знаходиться по два послідовно з'єднаних провідників.

При визначенні загального опору «мостової схеми» була використана симетрія. Існують прийоми, що дозволяють розраховувати опір подібних кіл. Для цього розглянемо коло, що складається з однакових провідників, включених в кожну з сторін квадрата. Крім того, кожна з вершин з'єднана з центром квадрата такими ж провідниками (мал. 9).

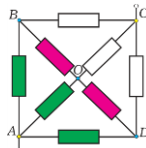
Залежно від точок підключення кола в ньому виявляються різні види симетрії.

Для визначення опору між точками A і C застосуємо метод виключення ділянок ланцюга.

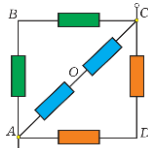
З симетрії схеми (мал. 10) слідує, що по виділенім зеленим кольором провідникам йтимуть однакові струми, отже, потенціали точок B, O і D будуть однакові. Тоді по провідникам, що виділені червоним кольором, струми йти не будуть, і їх можна видалити з кола, це не змінить його загальний опір. В результаті схема спроститься (мал. 11), виділені однакою провідники трьох гілок виявляться з'єднаними послідовно, а самі гілки з'єднані між собою паралельно.



Мал. 9



Мал. 10



Мал. 11

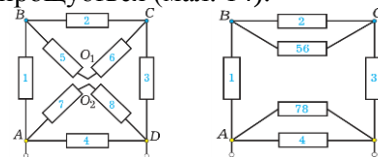
Розглянемо інше підключення кола, схема якого показана на мал. 21. Використаємо метод розрізання вузлів для визначення опору між точками A і D кола.

Для цього вузол O розділимо на два, отримавши при цьому точки O_1 і O_2 з однаковими потенціалами (рівними середньому арифметичному потенціалів вузлів A і D). Пронумеруємо провідники для зручності опису (мал. 12).

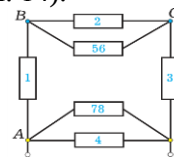
Після розрізання вузла O провідники 5 і 6 виявилися з'єднаними послідовно так само, як і провідники 7 і 8. Замінивши їх провідниками з еквівалентними опорами, отримаємо більш просту схему (мал. 13).

Замінімо тепер паралельно з'єднані провідники 2 і 56 провідником з еквівалентним

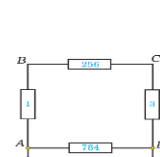
опором R_{256} . Зробимо аналогічно і з провідниками 78 і 4: еквівалентний опір R_{784} також дорівнює 4 Ом. Тепер схема ще більш спрощується (мал. 14).



Мал. 12



Мал. 13



Мал. 14

Метод склеювання вузлів є зворотнім по відношенню до попереднього.

Наведені методи перетворення контурів реалізовані у навчальній системі, описаній нижче.

4. Навчальна система для відображення та обчислення опору ділянки електричного кола

Процес розв'язування задач на визначення опору електричного кола наочно демонструється за допомогою програмного засобу «Навчальна система для відображення та обчислення опору ділянки електричного кола», призначеного для використання під час вивчення теми «Електричні явища. Електричний струм» з курсу фізики середньої загальноосвітньої школи за допомогою комп'ютера.

Програмний засіб дозволяє моделювати побудову ділянки електричного кола та демонструвати її покрокове спрощення для обчислення опору цієї ділянки.

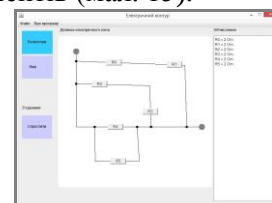
Функціональні характеристики комп'ютерної навчальної системи:

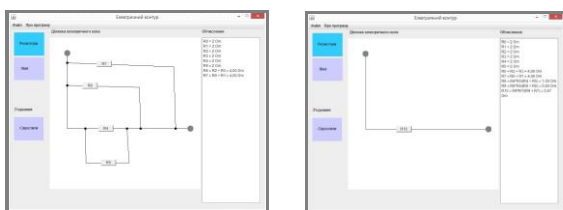
- побудова ділянки електричного кола;
- покрокове спрощення ділянки електричного кола;
- відображення формул для обчислення опору ділянки електричного кола;

Після вибору команди «Запустити» у вікні з'являється поле для побудови ділянки електричного кола та кнопка «Клеми».

Після розміщення клем на полі для побудови з'являються об'єкти управління, за допомогою яких створюється з'єднання лініями. На лініях розміщуються резистори, які автоматично нумеруються по порядку.

Натисканням кнопки «Спростити» покроково спрощується схема ділянки і автоматично обчислюється опір компонентів (мал. 15).





Мал. 15

Оскільки в розробленому програмному засобі моделюється процес, що вивчається або досліджується, відображається наочна навчальна інформація у вигляді числових даних, анімаційних малюнків, розробка може бути використана в загальноосвітніх навчальних закладах при вивченні окремих тем програми з розділу «Електричні явища. Електричний струм» [4].

Для реалізації створення програмного засобу було використано середовище розробки NetBeans IDE 7.2.1 – безкоштовне, вільно поширюване, с відкритим вихідним кодом інтегроване

середовище розробки додатків (IDE) на мові програмування Java.

5. Висновки та подальші напрямки роботи

В результаті проведених досліджень було розглянуто деякі фізичні експерименти з розділу «Електричні явища. Електричний струм», побудовано математичні моделі, а на їх основі розроблено та реалізовано алгоритми, які дають змогу змодельовати процес побудови ділянки електричного кола і обчислення її опору. На основі побудованих математичних моделей створено програмний продукт «Навчальна система для відображення та обчислення опору ділянки електричного кола», який дає можливість наочно продемонструвати вищезгадані процеси.

Подальші дослідження спрямовані на перетворення створеного засобу навчання на повноцінний педагогічний програмний засіб з включенням всіх його складових частин (теоретичного матеріалу, системи тестування та контролю тощо).

Список використаних джерел

1. Головка М. В. Генеза впровадження інформаційно-комунікаційних технологій у фізичній освіті: від комп'ютерної підтримки навчання до формування ключових і предметних компетентностей / М. В. Головка // Інформаційні технології і засоби навчання. - 2015. - Т. 45, вип. 1. - С. 1-11. - Режим доступу: http://nbuv.gov.ua/UJRN/ITZN_2015_45_1_3
2. Особливості використання комп'ютерно-орієнтованих засобів навчання [Електронний ресурс]. – Режим доступу: khustlicey.ucoz.ua/atestacy/Telishko_S_I/ayto_ref/3.doc
3. Бондаров М. Н. Расчет сопротивления электрической цепи. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: [http://potential.org.ru/pub/Phys/WebHome/E-13\(1\).pdf](http://potential.org.ru/pub/Phys/WebHome/E-13(1).pdf)
4. Фізика. 7-9 класи. Навчальна програма. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://mon.gov.ua/content/Osvita/fizika-08-06-2015.pdf>

References

1. HOLOVKO, M. (2015) Genesis of the implementation of information and communication technologies in physical education: from computer support of teaching to the formation of key and subject competences. Information technology and learning tools. 45(1). pp. 1-11. [Online] Available from: http://nbuv.gov.ua/UJRN/ITZN_2015_45_1_3 [Accessed: 4th March 2017].
2. Features of the use of computer-based learning tools [Online] Available from: khustlicey.ucoz.ua/atestacy/Telishko_S_I/ayto_ref/3.doc [Accessed: 4th March 2017].
3. BONDAROV, M. Calculation of electrical circuit resistance. [Online] Available from: [http://potential.org.ru/pub/Phys/WebHome/E-13\(1\).pdf](http://potential.org.ru/pub/Phys/WebHome/E-13(1).pdf) [Accessed: 4th March 2017].
4. Physics. 7-9 classes. Curriculum [Online] Available from: <http://mon.gov.ua/content/Osvita/fizika-08-06-2015.pdf> [Accessed: 4th March 2017].

Надійшла до редколегії 22.03.2017

УДК 517.95:419.86:539.3

Стоян В.А., професор
Даниш С.Т., аспірант

**Про математичне моделювання
розв'язку тривимірної задачі динамічної
теорії пружності**

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т.
Академіка Глушкова 4д,
e-mail: v_a_stoyan@ukr.net, danysh@i.ua

V.A.Stoyan, professor
S.T. Danysh, PhD candidate

**About mathematical modeling of three-
dimensional problem solving dynamic
elasticity**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: v_a_stoyan@ukr.net, danysh@i.ua

Розглядається задача побудови поля динамічних зміщень тривимірного пружного тіла з довільною геометрією його зовнішньої поверхні. Основою для постановки задачі є класичні рівняння просторової теорії пружності у формі Ляме, доповнені гранично-динамічними спостереженнями за тілом.

Розв'язок задачі будується у вигляді суми трьох складових, які відповідають дії об'ємно визначених, початкових та граничних зовнішньодинамічних збурень. Розглядаються випадки, коли дискретно визначені зовнішньодинамічні спостереження за початково-крайовим станом тіла моделюються системою дискретно та неперервно визначених моделюючих функцій. Для неперервних спостережень система моделюючих функцій обмежується їх дискретним визначенням.

Знаходження введених таким чином моделюючих функцій зводиться до розв'язання систем лінійних алгебраїчних, інтегральних і функціональних рівнянь, які псевдообертаються за середньоквадратичним критерієм. Будуються і досліджуються на точність і однозначність множини псевдорозв'язків названих рівнянь, а тим самим і множини розв'язків задач по побудові тривимірного поля динамічних зміщень розглядуваного тіла.

Ключові слова: математичне моделювання, неповно спостережувані динамічні системи, просторові задачі теорії пружності.

The task of building a dynamic displacement field of three-dimensional elastic body of arbitrary geometry of its outer surface. The basis for the formulation of the problem is the classical equation of spatial elasticity in the form of Lamé, supplemented by maximum dynamic monitoring of the body. There is no limit to the number of observations, as well as their quality is not imposed - they must be content with differential-linear combination of dynamic displacement vector points of the body and its boundary surface.

Solution of the problem is constructed as a sum of three components that meet the specified action space, initial and boundary external dynamic disturbances. The fate of the space defined dynamic disturbances defined three-dimensional integrated solution of Lamé equations with the kernel, which is the transfer function of the proposed elastic medium and is constructed in the form of a complex Cauchy integral defined area. Initial and boundary perturbations modeled by external dynamic system of fictitious disturbing factors identified outside the proposed body and the time interval in which it examines the dynamics.

The cases where discrete external dynamic by monitoring the initial boundary state of the body modeled system discretely and continuously defined modeling functions. For continuous observation system modeling functions limited to discrete definition.

Finding imposed thereby simulating the functions is reduced to solving systems of linear algebraic, integral and functional equations for the pseudoinverse criterion. Constructed and investigated the accuracy and simplicity of the set of pseudosolutions of these equations, and thus the set of solutions of problems on the construction of three-dimensional dynamic displacement field of the proposed body.

Keywords: mathematical modeling, incompletely observed dynamical systems, spatial problem of elasticity

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

Вступ

Тривимірні задачі теорії пружності для просторово-динамічних областей традиційно вважалися складними. Проблеми виникали як в математичному описі диференціальних процесів у таких областях, так і в математично коректному формулюванні початково-крайових задач та побудові ефективних алгоритмів їх розв'язання. Строгі математичні розв'язки таких задач отримані тільки для канонічних областей з класично визначеними початково-крайовими умовами. Прикладні ж постановки задач на жаль залишаються важко доступними для розв'язання.

Нижче, ґрунтуючись на класично відомих [1] рівняннях тривимірної теорії пружності у формі Ляме та методиці математичного моделювання розв'язків некоректно сформульованих початково-крайових задач для неповно спостережуваних просторово розподілених динамічних систем, запропонованій в [2], ставляться та розв'язуються складні і практично важливі задачі побудови поля динамічних зміщень точок тривимірного пружного тіла з довільною граничною поверхнею за наявності довільної кількості дискретно та неперервно визначених спостережень за початковим станом тіла та поточними умовами навантаженості його поверхні. Оцінюється точність розв'язання сформульованих задач, визначаються і умови їх однозначності.

1. Постановка задачі. Розглянемо тривимірне пружне середовище, динаміка якого на часовому інтервалі $t \in [0, T]$ в декартовій системі координат x_1, x_2, x_3 описується рівнянням

$$L(\partial_s)u(s) = f(s) \quad (1)$$

де
 $L(\partial_s) =$

$$= \begin{pmatrix} (\lambda + 2\mu)\partial_{x_1}^2 + \mu(\partial_{x_2}^2 + \partial_{x_3}^2) - \rho\partial_t^2 & (\lambda + \mu)\partial_{x_1}\partial_{x_2} & (\lambda + \mu)\partial_{x_1}\partial_{x_3} \\ (\lambda + \mu)\partial_{x_2}\partial_{x_1} & (\lambda + 2\mu)\partial_{x_2}^2 + \mu(\partial_{x_1}^2 + \partial_{x_3}^2) - \rho\partial_t^2 & (\lambda + \mu)\partial_{x_2}\partial_{x_3} \\ (\lambda + \mu)\partial_{x_3}\partial_{x_1} & (\lambda + \mu)\partial_{x_3}\partial_{x_2} & (\lambda + 2\mu)\partial_{x_3}^2 + \mu(\partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2) - \rho\partial_t^2 \end{pmatrix}$$

– матричний диференціальний оператор, в якому $s = (x, t) = (x_1, x_2, x_3, t)$, $\partial_s = (\partial_x, \partial_t) = (\partial_{x_1}, \partial_{x_2}, \partial_{x_3}, \partial_t)$ – вектор похідних за просторовими координатами x_1, x_2, x_3 та часом t , ρ – питома вага тіла, λ і μ – константи Ляме, $u = \text{col}(u_1, u_2, u_3)$ – вектор динамічних зміщень точки $x = (x_1, x_2, x_3)$ в напрямку

координатних осей Ox_1, Ox_2, Ox_3 , а $f = \text{col}(f_1, f_2, f_3)$ – вектор масових сил.

З названого пружного середовища поверхнею Γ виділимо пружне тіло, динаміку просторової області S_0 якого будемо досліджувати на часовому інтервалі $[0, T]$.

Будемо виходити з того, що за тілом в момент часу $t = 0$ та його поверхнею Γ при $t \in [0, T]$ мають місце наступні спостереження:

$$L_r(\partial_t)u(s)\Big|_{t=0} = U_r^0(x) \quad (x \in S_0; r = \overline{1, R_0}), \quad (2)$$

$$L_p^r(\partial_x)u(s) = U_p^r(s) \quad (s \in \Gamma \times [0, T]; p = \overline{1, R_\Gamma}), \quad (3)$$

або

$$L_r^l(\partial_t)u(s)\Big|_{\substack{t=0 \\ x=x_l^0 \in S_0}} = U_{rl}^0 \quad (r = \overline{1, R_0}; l = \overline{1, L_0}), \quad (4)$$

$$L_p^l(\partial_x)u(s)\Big|_{s=s_l^r \in \Gamma \times [0, T]} = U_{pl}^r \quad (p = \overline{1, R_\Gamma}; l = \overline{1, L_\Gamma}), \quad (5)$$

де $L_r^l(\partial_t)$ ($r = \overline{1, R_0}$), $L_p^l(\partial_x)$ ($p = \overline{1, R_\Gamma}$) – лінійні диференціальні оператори, $U_r^0(x)$ ($r = \overline{1, R_0}$), $U_p^r(s)$ ($p = \overline{1, R_\Gamma}$) – задані функції, а U_{rl}^0 ($r = \overline{1, R_0}; l = \overline{1, L_0}$), U_{pl}^r ($p = \overline{1, R_\Gamma}; l = \overline{1, L_\Gamma}$) – їх значення в точках $(x_l^0, 0)$, та (s_l^r) відповідно.

Побудуємо вектор-функцію $u(s)$ зміщень точок тіла, яка була б розв'язком (1) і за середньоквадратичним критерієм узгоджувалася зі спостереженнями (2), (3) та (4), (5) незалежно від кількості та якості останніх. При цьому будемо виходити з інтегрального еквіваленту системи рівнянь (1), який подамо у вигляді

$$u(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(s-s')f(s')ds', \quad (6)$$

де

$$G(s-s') = \frac{1}{(2\pi i)^4} \int_{-\infty}^{+\infty} L^{-1}(p, q) D(p, q, s-s') dp dq, \quad (7)$$

i – уявна одиниця, $p = (p_1, p_2, p_3)$, а

$$D(p, q, s-s') = \text{diag}(e^{p(x-x') + q(t-t')}, l = \overline{1, L}).$$

2. Математичне моделювання динаміки неперервно спостережуваного пружного тіла. Розглянемо задачу (1) – (3). З врахуванням передаточних властивостей функції $G(s-s')$ розв'язок задачі подамо у вигляді

$$u(s) = u_\infty(s) + u_0(s) + u_\Gamma(s), \quad (8)$$

де

$$\begin{aligned} u_\infty(s) &= \int_{S_0} dx' \int_0^T G(s-s') f(s') dt', \\ u_0(s) &= \sum_{m=1}^{M_0} G(s-s_m^0) f_{0m}, \\ u_\Gamma(s) &= \sum_{m=1}^{M_\Gamma} G(s-s_m^\Gamma) f_{\Gamma m}, \end{aligned} \quad (9)$$

а f_{0m} ($m = \overline{1, M_0}$) та $f_{\Gamma m}$ ($m = \overline{1, M_\Gamma}$) – значення невідомих моделюючих функцій $f_0(s)$ ($s \in S^0 = S_0 \times (-\infty, 0]$) та $f_\Gamma(s)$ ($s \in S^\Gamma = (R^3 \setminus S_0) \times [0, T]$) в точках s_m^0 ($m = \overline{1, M_0}$) та s_m^Γ ($m = \overline{1, M_\Gamma}$).

Оскільки представлення (8), (9) рівнянню (1) задовольняє точно [2] за любых f_{0m} ($m = \overline{1, M_0}$) та $f_{\Gamma m}$ ($m = \overline{1, M_\Gamma}$), то для знаходження векторів

$$\begin{aligned} f_0 &= \text{col}(f_{0m}, \quad m = \overline{1, M_0}), \\ f_\Gamma &= \text{col}(f_{\Gamma m}, \quad m = \overline{1, M_\Gamma}) \end{aligned}$$

співвідношення (8), (9) підставимо в (2), (3).

В результаті цього отримаємо наступну систему функціональних рівнянь:

$$A(s) \bar{f} = U(s) \quad (10)$$

де $\bar{f} = \text{col}(f_0, f_\Gamma)$,

$$A(s) = \begin{pmatrix} (A_{11}(x) \quad (x \in S_0)) & (A_{12}(x) \quad (x \in S_0)) \\ (A_{21}(s) \quad (s \in \Gamma \times [0, T])) & (A_{22}(s) \quad (s \in \Gamma \times [0, T])) \end{pmatrix}$$

$$U(s) = \begin{pmatrix} (U_0(x) \quad (x \in S_0)) \\ (U_\Gamma(s) \quad (s \in \Gamma \times [0, T])) \end{pmatrix},$$

$$A_{11}(x) = \text{col}(\text{str}(L_r^0(\partial_t)G(s-s_m^0))|_{t=0}, m = \overline{1, M_0}, r = \overline{1, R_0}),$$

$$A_{12}(x) = \text{col}(\text{str}(L_r^0(\partial_t)G(s-s_m^\Gamma))|_{t=0}, m = \overline{1, M_\Gamma}, r = \overline{1, R_0}),$$

$$A_{21}(s) = \text{col}(\text{str}(L_\rho^\Gamma(\partial_x)G(s-s_m^0)), m = \overline{1, M_0}, \rho = \overline{1, R_\Gamma}),$$

$$A_{22}(s) = \text{col}(\text{str}(L_\rho^\Gamma(\partial_x)G(s-s_m^\Gamma)), m = \overline{1, M_\Gamma}, \rho = \overline{1, R_\Gamma}),$$

$$U_0(x) = \text{col}(U_r^0(x), r = \overline{1, R_0}),$$

$$U_\Gamma(s) = \text{col}(U_\rho^\Gamma(s), \rho = \overline{1, R_\Gamma}).$$

Розв'язком (або середньоквадратичним наближенням до нього) системи (10) будуть [2] вектори

$$\begin{aligned} f_0 &= (Q_{11}, Q_{12})A_U + v_0 - (Q_{11}, Q_{12})Pv, \\ f_\Gamma &= (Q_{21}, Q_{22})A_U + v_\Gamma - (Q_{21}, Q_{22})Pv, \end{aligned} \quad (11)$$

де за довільних M_0 - та M_Γ -вимірних векторів v_0 і v_Γ

$$v = \text{col}(v_0, v_\Gamma),$$

$$[Q_{ij}]_{i,j=1}^{i,j=2} = P^+,$$

$$P = \int_{(\bullet)} A^T(s) A(s) ds,$$

$$A_U = \int_{(\bullet)} A^T(s) U(s) ds,$$

а знаком $(\bullet)$ позначено інтегрування по області визначення аргументу підінтегральної функції.

Розв'язок (11) буде однозначним $v \equiv 0$, якщо $\det P > 0$. Точністю псевдообернення системи (10) буде визначатися і точність розв'язання розглядуваної задачі, а саме

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 &= \sum_{r=1}^{R_0} \int_{S_0} \|L_r^0(\partial_t)u(s)|_{t=0} - U_r^0(x)\|^2 dx + \\ &+ \sum_{\rho=1}^{R_\Gamma} \int_{\Gamma \times [0, T]} \|L_\rho^\Gamma(\partial_x)u(s) - U_\rho^\Gamma(s)\|^2 ds = \\ &= \int_{(\bullet)} \|A(s) \bar{f} - U(s)\|^2 ds = \\ &= \int_{(\bullet)} \|U^T(s)U(s)ds - A_U^T P^+ A_U\|^2. \end{aligned}$$

3. Математичне моделювання динаміки дискретно спостережуваного пружного тіла.

Дамо розв'язок задачі (1), (4), (5). Визначаючи вектор-функцію $u(s)$ зміщень точок пружного тіла співвідношеннями (8), (9) для знаходження моделюючого вектора $\bar{f}$, як і вище, отримаємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь

$$A \bar{f} = U, \quad (12)$$

в яких при визначеному вище векторі $\bar{f}$,

$$A = (\text{col}(\text{str} A_{ij}, j = \overline{1, 2}), i = \overline{1, 2}),$$

$$A_{11} = \text{col}((\text{str}(L_r^0(\partial_t)G(s-s_m^0))|_{t=0}, m = \overline{1, M_0}, l = \overline{1, L_0}, r = \overline{1, R_0}),$$

$$A_{12} = \text{col}((\text{str}(L_r^0(\partial_t)G(s-s_m^\Gamma))|_{t=0}, m = \overline{1, M_\Gamma}, l = \overline{1, L_0}, r = \overline{1, R_0}),$$

$$A_{21} = \text{col}((\text{str}(L_\rho^\Gamma(\partial_x)G(s-s_m^0))|_{s=s_j^\Gamma}, m = \overline{1, M_0}, l = \overline{1, L_\Gamma}, \rho = \overline{1, R_\Gamma}),$$

$$A_{22} = \text{col}((\text{str}(L_\rho^\Gamma(\partial_x)G(s-s_m^\Gamma))|_{s=s_j^\Gamma}, m = \overline{1, M_\Gamma}, l = \overline{1, L_\Gamma}, \rho = \overline{1, R_\Gamma}),$$

$$U = \text{col}(U_0, U_\Gamma),$$

$$U_0 = \text{col}((U_{rl}^0, \quad l = \overline{1, L_0}), \quad r = \overline{1, R_0}),$$

$$U_\Gamma = \text{col}((U_{\rho l}^\Gamma, \quad l = \overline{1, L_\Gamma}), \quad \rho = \overline{1, R_\Gamma}).$$

Розв'язком останньої таким, що

$$\| \bar{A}f - U \|^2 \rightarrow \min_f,$$

будуть вектори

$$f_0 = (A_{11}^T, A_{21}^T)P^+(U - Av) + v_0,$$

$$f_\Gamma = (A_{12}^T, A_{22}^T)P^+(U - Av) + v_\Gamma$$

за довільних $3M_0$ - та $3M_\Gamma$ - вимірних векторів v_0 та v_Γ , тотожно рівних нулю, якщо $\det A^T A > 0$, $v = \text{col}(v_0, v_\Gamma)$, $P = AA^T$. При цьому

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 &= \sum_{r=0}^{R_0} \sum_{l=0}^{L_0} \| L_r^0(\partial_l)u(s) \big|_{t=0}^{x=x_l^0} - U_{rl}^0 \|^2 + \\ &+ \sum_{\rho=0}^{R_\Gamma} \sum_{l=0}^{L_\Gamma} \| L_\rho^\Gamma(\partial_x)u \big|_{s=s_l^\Gamma} - U_{\rho l}^\Gamma \|^2 = \\ &= \| \bar{A}f - U \|^2 = U^T U - U^T P P^+ U. \end{aligned}$$

Задача (1), (4), (5) може бути успішно розв'язана і у випадку, коли дискретні спостереження (4), (5) моделюються функціями $f_0(s)$ та $f_\Gamma(s)$, визначеними неперервно. В цьому випадку складові $u_0(s)$ та $u_\Gamma(s)$ вектор-функції $u(s)$ подамо співвідношеннями

$$\begin{aligned} u_0(s) &= \int_{s^0} G(s-s') f_0(s') ds', \\ u_\Gamma(s) &= \int_{s^\Gamma} G(s-s') f_\Gamma(s') ds'. \end{aligned} \quad (13)$$

Після підстановки (8), (13) в (4), (5) отримаємо розв'язуючу систему рівнянь для знаходження моделюючих функцій $f_0(s)$ та $f_\Gamma(s)$. Вона буде наступною:

$$\int_{(\bullet)} A(s) \bar{f}(s) ds = U, \quad (14)$$

де за визначеного вище вектора U

$$\begin{aligned} A(s) &= \begin{pmatrix} (A_{11}(s) \ (s \in S^0)) & (A_{12}(s) \ (s \in S^\Gamma)) \\ (A_{21}(s) \ (s \in S^0)) & (A_{22}(s) \ (s \in S^\Gamma)) \end{pmatrix}, \\ \bar{f}(s) &= \begin{pmatrix} f_0(s) \\ f_\Gamma(s) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Список використаних джерел

1. Лурье А. И. Пространственные задачи теории упругости. – М.: ГОСТЕХИЗДАТ, 1955. – 492 с.
2. Стоян В. А. Математичне моделювання лінійних, квазілінійних і нелінійних динамічних систем. – Київ.: ВПЦ «Київський університет», 2011. – 320 с.

при

$$A_{li}(s') = \text{col}(L_r^0(\partial_l)G(s-s') \big|_{x=x_l^0}, \quad l = \overline{1, L_0}), \quad r = \overline{1, R_0}),$$

$$A_{2i}(s') = \text{col}(L_\rho^\Gamma(\partial_x)G(s-s') \big|_{s=s_l^\Gamma}, \quad l = \overline{1, L_\Gamma}), \quad \rho = \overline{1, R_\Gamma})$$

($s' \in S^0$ при $i = 1$; $s' \in S^\Gamma$ при $i = 2$).

Розв'язком (14) таким, що

$$\| \int_{(\bullet)} A(s) \bar{f}(s) ds - U \|^2 \rightarrow \min_{\bar{f}(s)},$$

буде

$$f_0(s) = (A_{11}^T(s), A_{21}^T(s))P^+(U - A_v) + v_0(s),$$

$$f_\Gamma(s) = (A_{12}^T(s), A_{22}^T(s))P^+(U - A_v) + v_\Gamma(s),$$

при $v(s) = \text{col}(v_0(s), v_\Gamma(s))$,

$$P = \int_{(\bullet)} A(s) A^T(s) ds$$

$$A_v = \int_{(\bullet)} A(s) v(s) ds,$$

що і розв'язує задачу з визначеною вище точністю ε^2 .

Висновок

Розв'язана складна математична задача побудови поля просторових динамічних зміщень точок тривимірного пружного тіла з довільною геометрією його граничної поверхні за доступної для спостережень дискретно або неперервно визначеної інформації про початковий стан тіла та поточний стан його граничної поверхні. Знайдені в роботі компоненти вектора динамічних зміщень точок тіла точно задовольняють класично відомим рівнянням Ляме і за середньоквадратичним критерієм узгоджуються з наявними початково-крайовими спостереженнями за тілом. Задача формулюється і розв'язується з максимальною направленістю на практичне використання, що особливо важливо для таких математично складних задач просторової теорії пружності.

References

1. LURIE A.I. (1955) Spatial problems of elasticity theory. Moscow: Gostekhizdat.
2. STOYAN V.A. (2011) Mathematical modeling of linear, quasi-linear and nonlinear dynamic systems. Kyiv: VPTS "Kyivskyi universytet".

Надійшла до редакції 09.02.2017

УДК 004.6

Терещенко В.М., д.ф.-м.н., проф.
Танчук В.В., аспірант
Терещенко Я.В., магістр

Розпізнавання та побудова контурів об'єкта на зображенні за допомогою діаграми Вороного

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

V.M. Tereshchenko, Dr.Sci., prof.
V.V. Tanchuk, PhD
Y.V. Tereshchenko, Master

The properties of the network model with different types of nodes in the stationary regime

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: tanchuk.v.v@gmail.com,
vtereshch@gmail.com

Дана робота присвячена розробці програмного забезпечення для аналізу 2.5D зображень зроблених за допомогою камери Kinect від корпорації Microsoft. Запропоновано алгоритм, на основі діаграми Вороного, для розпізнавання та побудови контурів одного, або більше об'єктів які знаходяться на певній відстані від камери незалежно від їх форми та типу. Зроблено детальний огляд сучасних методів побудови контуру об'єкта на зображенні та проведено порівняльний аналіз практичного застосування цих методів з запропонованим алгоритмом. Обґрунтовано асимптотичну складність запропонованого алгоритму. Описано практичну реалізацію запропонованого алгоритму та структуру даних необхідну для оптимізації. Приведені зображення з результатами практичного застосування запропонованого алгоритму для описаної задачі.

Ключові слова: комп'ютерний зір, розпізнавання об'єктів, побудова контурів, діаграма Вороного

This work is devoted to developing software for the analysis of 2.5D images taken by the camera Kinect from Microsoft. The proposed algorithm is intended for segmentation of different types of objects on the RGB-D image. An algorithm based on Voronoi diagram for recognition and building outlines of one or more objects located at a certain distance from the camera, regardless of their shape and type. Make a detailed review of current methods of constructing contour of the object in the image and a comparative analysis of the practical application of these methods, the proposed algorithm. Asymptotic complexity of the algorithm is proved. Describe a detailed comparison of the proposed algorithm with Brute-force based algorithm. Fortune's algorithm is examined, an $O(n \log(n))$ algorithm for generating a Voronoi diagram from a set of points in a plane. Describe the practical implementation of the proposed algorithm and data structure necessary for optimization. Image shown the results of practical application of the proposed algorithm described problem.

Key Words: computer vision, object recognition, building outlines, Voronoi diagram

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

1. Вступ.

Сьогодні все більшої популярності в галузі штучного інтелекту набуває такий напрямок як, комп'ютерний зір. Комп'ютерний зір або комп'ютерне бачення — теорія та технологія створення машин, які можуть проводити виявлення, стеження та класифікацію об'єктів. Як наукова дисципліна, комп'ютерний зір належить до теорії та технології створення штучних систем, які отримують інформацію у вигляді зображень. Відеодані можуть бути представлені у вигляді багатьох форм, таких як відеопослідовність, зображення з різних камер або тривимірними даними з медичного сканера.

Існуючі теорії та моделі дозволяють створювати автоматизовані системи комп'ютерного зору.

Прикладами таких систем можуть бути:

1. Системи керування процесами (промислові роботи, автономні транспортні засоби) [5];

2. Системи відеоспостереження [5];

3. Системи організації інформації (наприклад, для індексації баз даних зображень) [1];

4. Системи моделювання об'єктів або оточуючого середовища (аналіз медичних зображень, топографічне моделювання) [3];

5. Системи взаємодії (наприклад, пристрої введення для систем людино-машинної взаємодії) [3].

Однією з головних цілей комп'ютерного зору при обробці зображень є інтерпретація вмісту на зображенні. Для цього необхідно якісно відокремити фон від об'єктів. Сегментація розділяє зображення на складові частини або об'єкти. Вона відокремлює об'єкт від фону, щоб можна було легко обробляти зображення і ідентифікувати його вміст. В даному випадку виділення контурів на зображенні є фундаментальним засобом для якісної сегментації зображення. Виділення контурів об'єктів на зображенні в значній мірі зменшують кількість даних, які необхідно обробити, і в той же час зберігає важливу інформацію про об'єкти на зображенні, їх форму, розмір та кількість.

Цій тематиці у технічній літературі присвячено велику кількість робіт [2,6,8], і зокрема, наведено і описано велику кількість алгоритмів виділення контурів [4,7,9-10].

В роботі Робертса [9] пропонується метод виділення контурів, який виконує прості і швидкі обчислення на зображенні у двовимірному випадку. Цей метод підкреслює області високої просторової частоти, які часто відповідають краям. На вхід оператора подається напівтоноване зображення. Значення пікселів вихідного зображення в кожній точці передбачає якусь величину просторового градієнта вхідного зображення в цій же точці.

У методі виявлення контурів Собеля [7] використовується наближення до похідної, що дозволяє виявляти край в тих місцях, де градієнт найвищий. Даний спосіб виявляє кількість градієнтів на зображенні, тим самим виділяючи області з високою просторовою частотою, які відповідають контурам. В цілому це приводить до знаходження передбачуваної абсолютної величини градієнта в кожній точці вхідного зображення. Даний оператор складається з двох матриць, розміром 3 на 3. Друга матриця відрізняється від першої тільки тим, що повернута на 90 градусів.

Метод Превітта [7] дуже схожий на метод Робертса, проте виявлення контурів даним методом обчислюється набагато простіше, ніж методом Собеля, але призводить до більшої зашумленості результуючого зображення. Виявлення контурів даними оператором запропоновано в 1970 році. Правильним напрямком у даному алгоритмі була оцінка величини і орієнтація контуру. Навіть при тому, що виділення контурів є досить трудомістким завданням, такий підхід дає досить непогані результати. Даний алгоритм базується на використанні масок розміром 3 на 3, які враховують 8 можливих напрямків, але прямі напрямки дають найкращі результати. Всі маски згортки розраховані.

У 1971 році Кіршем був розроблений метод виявлення контурів [4]. Алгоритм заснований на використанні всього однієї маски, яку обертають по восьми головних

напрямах: північ, північний захід, захід, південний захід, південь, південний схід, схід і північний схід. Величина контуру визначена як максимальне значення, знайдене за допомогою маски. Певною маскою напрямком видає максимальну величину.

Метод Робінсона [10], розроблений в 1977, подібний до методу Кірша, але є більш простим в реалізації в силу використання коефіцієнтів 0, 1 і 2. Маски даного оператора симетричні відносно центральної осі, заповненої нулями. Достатньо отримати результат від обробки перших чотирьох масок, інші ж можна отримати, через інвертацію перших. Максимальне значення, отримане після застосування всіх чотирьох масок до пікселя і його оточенню вважається величиною градієнта, а кут градієнта можна апроксимувати як кут ліній нулів в масці, які дають максимальний відгук.

Провівши аналіз існуючих методів побудови контуру було визначено, що оператори Робертса, Собеля і Превітта [7] дають дуже різні результати. Кірш і Робінсон [4, 10] отримали приблизно однакові результати, проте отримані результати алгоритму Робінсона відзначаються більшою точністю сегментації. Усі зазначені методи ґрунтуються на одній з базових властивостей сигналу яскравості - розривності або використанні масок, у зв'язку з чим вони не в повній мірі задовольняють бажаний результат, адже алгоритми налаштовані на пошук контурів абсолютно всіх об'єктів, які є на зображенні.

2. Основна частина.

Постановка задачі. Для зображення, одержаного за допомогою 2.5D камери, виконати сегментацію його елементів (виділити контури об'єктів зображення) використовуючи структурні методи.

2.1 Метод розв'язання задачі.

Для розв'язання поставленої задачі найбільш підходящим підходом, на нашу думку, є використання діаграми Вороного.

На вхід даного алгоритму подається зображення у форматі 2.5D зроблене спеціальною камерою Kinect від Microsoft. Ми маємо два зображення, одне кольорове інше чорнобіле (Рис. 1).



Рис. 1 Кольорове та Depth зображення.

Тобто для кожного пікселя на зображенні ми маємо не тільки BGR(Blue, Green, Red) дані, які відповідають його кольору на зображенні, а й ще одну додаткову величину Depth, яка відповідає за відстань на якій знаходиться даний піксель відносно камери. BGR зазвичай задається трійкою чисел від 0 до 255, чим більше кожне значення тим більша присутність відповідного кольору у зображенні пікселя.

2.2 Детальний опис алгоритму.

1. На першому етапі роботи алгоритму ми створюємо три порожні множини точок Diagram, Object та Context.
2. Довільно обираємо певну кількість точок на зображенні, кожен з них додаємо до множини Diagram, яка є спільною множиною для обох видів точок (Рис. 2, а).
3. Для кожної з точок перевіряємо її відносно розташування, іншими словами чи потрапляє дана точка в потрібний нам проміжок. Якщо потрапляє то додаємо цю точку до множини Object, якщо ні то додаємо до множини Context (Рис. 2, б).
4. Після того як ми обрали необхідну кількість точок, будемо по даній множині точок діаграму Вороного – Diagram (Рис. 2, в).

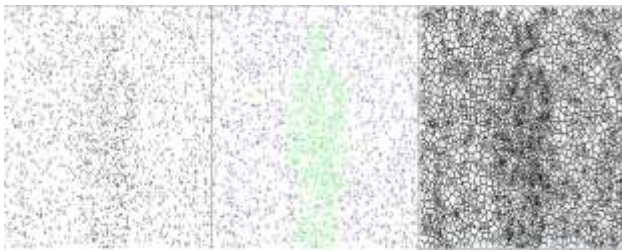


Рис. 2 а)Diagram; б)Object; в)Context.

5. Завершаючою частиною роботи алгоритму є проходження по всім ребрам діаграми Вороного, під час якого ми перевіряємо до яких множин належать точки, клітини яких розділяє кожне ребро. Якщо точки належать до різних підмножин, одна точка належить до множини Object а інша до множини Context, то ми додаємо дане ребро до контуру об'єкта (Рис. 3).



Рис. 3 Результат роботи алгоритму на 2250 точках.

Також, варто зазначити, що чим більша кількість точок тим більша точність побудови границі контуру (Рис. 4, Рис. 5).

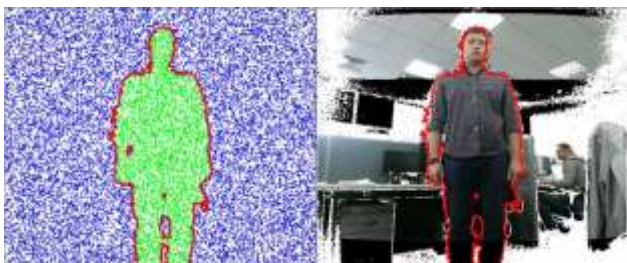


Рис. 4 Результат роботи алгоритму на 20000 точках.

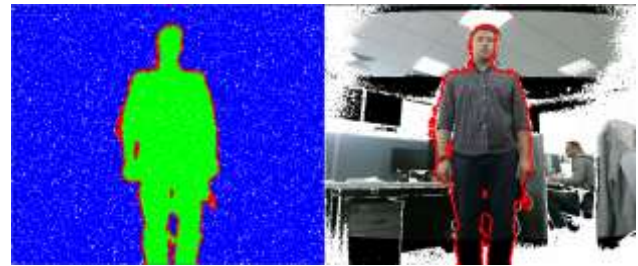


Рис. 5 Результат роботи алгоритму на 130000 точках.

3. Обґрунтування складності алгоритму.

Теорема 1. Задачу сегментації зображення, одержаного за допомогою 2.5D камери, можна виконати за час $O(n \log n)$ використовуючи Діаграму Вороного.

Доведення. Оскільки за основу запропонованого алгоритму взято саме діаграму Вороного, то асимптотична складність роботи алгоритму на пряму залежить від складності побудови діаграми, а точніше від кількості точок взятих за основу та кількості ребер отриманих після побудови діаграми.

Оцінка кількості ребер і вершин. Для $n \geq 3$ кількість вершин у діаграмі Вороного з n точок на площині становить не більше ніж $2n - 5$ і кількість ребер не більше ніж $3n - 6$.

Алгоритм Форчуна — алгоритм заснований на застосуванні замітаючої прямої. Замітаюча пряма — це допоміжний об'єкт, що являє собою вертикальну пряму лінію. На кожному кроці алгоритму діаграма Вороного побудована для множини, що складається з замітаючої прямої та точок ліворуч від неї. При цьому межа між областю діаграми Вороного та областями точок складається з відрізків парабол (оскільки геометричне місце точок, рівновіддалених від заданої точки та прямої — це парабола). Пряма рухається зліва направо. Кожний раз, коли вона проходить через чергову точку, ця точка додається до вже побудованої ділянки діаграми. Додавання точки до діаграми при використанні двійкового дерева пошуку має складність $O(\log n)$, всього точок n , а сортування точок по x -координаті може бути виконана за $O(n \log n)$, тому обчислювальна

складність алгоритму Форчуна дорівнює $O(n \log n)$.

Отже кінцева обчислювальна складність алгоритму складається з двох частин. Перша частина - це побудова діаграми Вороного за $O(n \log n)$ за допомогою алгоритму Форчуна, де n це кількість випадково обраних точок на картинці. Та друга частина алгоритму, це прохід по всіх ребрах діаграми Вороного для перевірки кожного ребра на належність до контуру об'єкта. Оскільки ребер буде не більше ніж $3n - 6$, то сумарна складність алгоритму буде складати $O(n \log n) + O(3n - 6)$ що в свою чергу зводиться до $O(n \log n)$.

На Рис. 6-7 зображений графік росту обчислювальної складності запропонованого алгоритму та алгоритму грубої сили (brute-force). Де по осі ОХ зображена кількість початково обраних випадковим чином точок, по осі ОУ зображена загальна кількість операцій. Алгоритм грубої сили полягає в проходженні по кожному пікселю на зображенні та визначенні в якому діапазоні він знаходиться, якщо піксель знаходиться у потрібному діапазоні та межує з будь-якої сторони з пікселем який лежить за межами потрібного діапазону то цей піксель буде частиною контуру. При побудові графіку за основу було взято зображення у розмірі 640 на 480 пікселів, тож загальна складність для алгоритму грубої сили буде складати 307200 операцій. З даного графіку видно що запропонований алгоритм доцільно використовувати у порівнянні з алгоритмом грубої сили при умові, якщо випадковим чином буде обрано не більше 40000 точок.

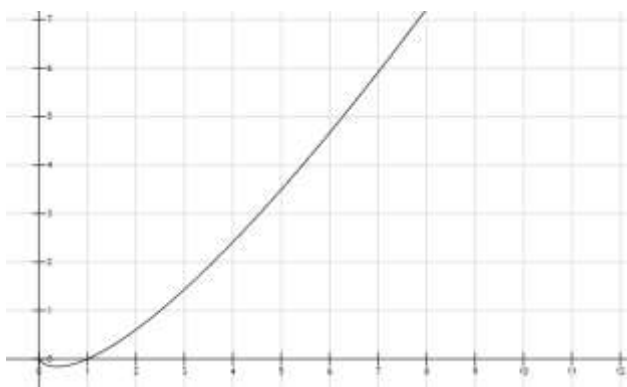


Рис. 6 Графік асимптотичної складності запропонованого алгоритму.

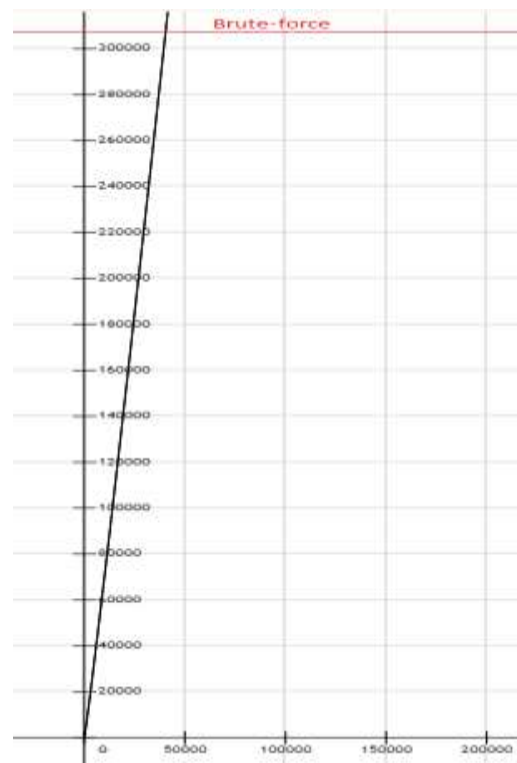


Рис. 7 Графік асимптотичної складності запропонованого алгоритму у порівнянні з Brute-force.

4. Висновок.

В представленій роботі запропоновано новий підхід до розпізнавання та побудови контуру об'єкта на 2.5D зображенні отриманого за допомогою Kinect камери. В основі підходу лежить застосування Діаграми Вороного та структура, яка її підтримує. Це дозволяє одержати кращу якість розпізнавання та розширити можливості сегментації зображення. Також у даній статті було досліджено та детально розглянуто популярні алгоритми розпізнавання контуру об'єкта на зображенні. На основі проведеного порівняльного аналізу визначено основні переваги та недоліки існуючих алгоритмів.

Створена програмна реалізація даного алгоритму потужностями мови C/C++ та бібліотеки для комп'ютерного зору OpenCV.

Список використаних джерел

1. Basuk T., Gejnich P., "Methods and means of multimedia information systems", Lviv Polytechnic National University, 426, 2015.
2. Hanzi Wang, "Robust Statistics for Computer Vision: Model Fitting, Image Segmentation and Visual Motion Analysis", Ph.D thesis, Monash University, Australia, 2004.
3. Ivanov A., "The theory of automatic control", Dnipro: National Mining University, 250, 2003.
4. Kirsch R., "Computer determination of the constituent structure of biological images", Computers and Biomedical Research, 1971.
5. Lewis Paul., "Every step you take: UK underground centre that is spy capital of the world", The Guardian, March 2, 2009.
6. Punam Thakare, "A Study of Image Segmentation and Edge Detection Techniques", International Journal on Computer Science and Engineering, Vol 3, No.2, 899-904, 2011.
7. Rafael C. Gonzalez, Richard E. Woods & Steven L. Eddins, "Digital Image Processing Using MATLAB", Pearson Education Ptd. Ltd, Singapore, 2004.
8. Ramadevi Y., "Segmentation and object recognition using edge detection techniques", International Journal of Computer Science and Information Technology, Vol 2, No.6, 153-161, 2010.
9. Roberts L., "Machine Perception of 3-D Solids", Optical and Electro-optical Information Processing, MIT Press, 1965.
10. Robinson G., "Edge detection by compass gradient masks", Computer graphics and image processing, 6, 492-501, 1977.

References

1. BASUK T., GEJNICH P. (2015), "Methods and means of multimedia information systems", Lviv Polytechnic National University, 426.
2. HANZI WANG (2004), "Robust Statistics for Computer Vision: Model Fitting, Image Segmentation and Visual Motion Analysis", Ph.D thesis, Monash University, Australia.
3. IVANOV A. (2003), "The theory of automatic control", Dnipro: National Mining University, 250.
4. KIRSCH R. (1971), "Computer determination of the constituent structure of biological images", Computers and Biomedical Research.
5. LEWIS PAUL. (2009), "Every step you take: UK underground centre that is spy capital of the world", The Guardian, March 2.
6. PUNAM THAKARE (2011), "A Study of Image Segmentation and Edge Detection Techniques", International Journal on Computer Science and Engineering, Vol 3, No.2, 899-904.
7. RAFAEL C. GONZALEZ, RICHARD E. WOODS, STEVEN L. EDDINS (2004), "Digital Image Processing Using MATLAB", Pearson Education Ptd. Ltd, Singapore.
8. RAMADEVI Y. (2010), "Segmentation and object recognition using edge detection techniques", International Journal of Computer Science and Information Technology, Vol 2, No.6, 153-161.
9. ROBERTS L. (1965), "Machine Perception of 3-D Solids", Optical and Electro-optical Information Processing, MIT Press.
10. ROBINSON G. (1977), "Edge detection by compass gradient masks", Computer graphics and image processing, 6, 492-501.

Надійшла до редакції 20.03.2017

УДК 004.942

Федорус О.М., аспірант

Застосування ПАРКС-С# для моделювання паралельно-рекурсивних процесів

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

Fedorus O.M, Grad. Stud.

Applying PARCS-C# for modeling parallel- recursive processes

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

У даній статті розглянуто приклад моделювання паралельно-рекурсивного процесу обчислення множення матриць з обмеженням за обсягом оперативної пам'яті, кількості переданих даних і обмеженими можливостями обчислення за допомогою ПАРКС-С#.

Ключові слова: ПАРКС, паралельне програмування, обробка матриць.

Due to the increase in the number of cores in modern CPUs, the development of high-parallel systems is becoming more and more interesting. In this article, we will consider an example of modeling parallel-recursive processes using the PARCS-C# technology. In this article will be implemented parallel-recursive algorithm for matrix multiplication in terms of PARCS. The PARCS model is based on the conception of a control space, which is used to describe parallel interacting processes. Structurally, the control space consists of addressable "points" and "channels". Executing modules are assigned to points and communicate through channels connecting points. Recursive embeddings of processes are allowed. An additional condition is that the computed fragments can only be two-by-two dimensions. Also, you can not transfer fragments of matrix larger than two-by-two.

The recursive algorithm operates in 2 stages. During the recursion expand phase, divides the matrix to the desired size. During the recursion feedback the two-by-two matrixes are retrieved and multiplied. Results that are multiplied - sending back and the necessary elements are summed up.

Key Words: PARCS, parallel computing, matrix processing.

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

Вступ. Нещодавно компанії-лідери з виробництва CPU (AMD і Intel) презентували нові серії своїх процесорів («Ryzen» від AMD і серія «i9» від Intel). В обох випадках основним трендом є підвищення продуктивності за рахунок збільшення кількості ядер і потоків. Ця тенденція в свою чергу сигналізує про необхідність розвитку алгоритмів паралельної обробки інформації, а також технологій програмування паралельних процесів. Як було вказано в статтях [1,2,3], технологія ПАРКС (паралельні асинхронні рекурсивно-керовані системи) є зручним засобом реалізації паралельних і

розподілених обчислень на багатопроцесорних (багатоядерних) системах. Основні концепції ПАРКС, такі як концепція нескінченного паралелізму та рекурсивність, повністю відповідають сучасним тенденціям розвитку апаратного забезпечення, а також вимогам розробників до технічних засобів реалізації паралельних алгоритмів.

Паралельно-рекурсивні алгоритми ефективно застосовуються в безлічі алгоритмів [4, 5]. Як вказано в статті [6], застосування рекурсії в деяких алгоритмах може підвищити його продуктивність.

Опис ПАРКС. ПАРКС-технологія програмування являє собою деякий набір програмних засобів що забезпечують процес розробки і реалізації алгоритмів паралельної (розподіленої) обробки інформації та базується на концепції керуючого простору (КП). Керуючий простір є динамічним графом, який

використовується для опису логічної і комунікаційної структури задачі. Завдяки КП ПАРКС-технологія дозволяє:

- підтримувати структурне паралельне програмування на основі динамічного і статичного паралелізму;
- опис рекурсії за даними і управлінням;

- на логічному рівні в явному вигляді описувати розподіл ресурсів, схеми;
- будувати систему віртуальних ПАРКС-машин, які забезпечують можливість паралельної /псевдопаралельної обробки інформації.

Основними термінами ПАРКС є:

- Точка,
- Програмний канал (ПК),
- Алгоритмічний модуль (АМ).

Структура керуючого простору - граф, вершинами якого є точки керуючого простору, а ребрами - програмні канали. До кожної точки КП приписаний АМ, який є процедурою ПАРКС-розширення базової мови. Виконання АМ може привести до зміни в структурі КП (додавання / видалення точок, каналів). АМ виконуються паралельно, однак їх виконання може бути призупинено. Точки КП, з'єднані програмним каналом, можуть отримувати та посилали повідомлення.

Алгоритмічний модуль - це процедура ПАРКС-розширення базової алгоритмічної мови програмування (наприклад Java, C#), яка забезпечує рівні можливості для віртуальних ПАРКС-машин.

КП складається з точок, а також каналів, які їх з'єднують. У кожній точці, на наступному рівні ієрархічного уявлення, може розвиватися новий керуючий простір. При побудові та обробці простору може використовуватися рекурсія по структурі КП. Точка КП повинна однозначно визначатися деяким ідентифікатором. Канали КП призначені для взаємодії між точками. Для кожного алгоритму існує адекватна йому структура КП. Наприклад, для паралельного алгоритму множення матриць структура КП буде представлена 8-зв'язним графом [7].

ПАРКС-модель визначається наступним чином:

- Виділяються кінцеві набори базових алгоритмічних модулів, які описують шляхи розпаралелювання алгоритмів за різними рівнями деталізації;
- визначаються правила взаємодії модуля та простору на всіх рівнях деталізації;
- уточнюються поняття рекурсії за даними і рекурсії по управлінню для заданої алгоритмічної мови.

Процес функціонування ПАРКС-моделі складається зі створення, знищення, функціонування та динамічної взаємодії алгоритмічних модулів.

Опис АМ являє собою розширення відповідної конструкції базової мови операціями ПАРКС.

Рекурсія на рівні алгоритмічного модуля проявляється в тому, що активні копії АМ можуть породжувати нові активні копії АМ. Апарат створення, знищення, модифікації, приписки активної копії алгоритмічного модуля в точки УП, взаємодії активних копій АМ дозволяє описувати рекурсію за даними, рекурсію управління та їх композицію.

Розробка ПАРКС-моделі передбачає можливість автоматичної побудови КП, який відображає динамічну структуру зв'язків в ПАРКС-моделі.

Постановка завдання та реалізація. Обчислити добуток квадратних матриць розмірності 2^N , де $1 < N < 32$, за умови, що апаратний модуль може робити обчислення тільки з матрицями розмірності 2×2 і зберігати в пам'яті не більше чотирьох таких матриць.

Для вирішення завдання застосуємо ідею класичного алгоритму «розділяй та володарюй». Оскільки матриці квадратні, а їх розмірність є ступенем двійки - будемо ділити матрицю на 4 рівних блоки й обчислювати за такою формулою:

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{pmatrix} \quad (1)$$

Очевидно, що в такому разі кожне множення блоків $A_{ij}B_{nk}$, (где $i, j, n, k \in \mathbb{N}$) є множенням матриць розрядності в 2 рази менше, тобто завдання множення матриць $2^N \times 2^N$ зведено до 8 множень і 4х сум матриць розрядності $2^{N-1} \times 2^{N-1}$. Сума матриць, яка виконується за формулою: $c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$ так само може бути зведена до суми матриць менших порядків. Таким чином множення матриць розмірності $2^N \times 2^N$ можна звести до операцій з матрицями розмірності 2×2 .

Перейдемо до опису рішення задачі в термінах ПАРКС (ПАРКС-модель). Для вирішення нам знадобляться 2 види алгоритмічних модулів:

1) Початковий модуль. Модуль, який буде починати аналіз завдання і виконувати початкове розбиття. Крім цього, він буде записувати результати обчислень.

2) Рекурсивний модуль. Модуль, який буде аналізувати отриманий фрагмент і, якщо він розмірності 2×2 , буде його обчислювати. Якщо ж отриманий фрагмент більшої розмірності, то модуль буде ділити його на частини і передавати їх для обчислення новим, породженням точкам з функціоналом рекурсивного модуля. Після розбиття він чекатиме результати від породжених

точок, збиратиме їх і передаватиме в точку, що знаходиться вище в ієрархії.

Загальна структура керуючого простору з огляду на точки і канали що їх з'єднують, будуть

утворювати 8-листоє дерево. Наприклад, для матриці розмірності 8×8 дерево буде виглядати наступним чином:

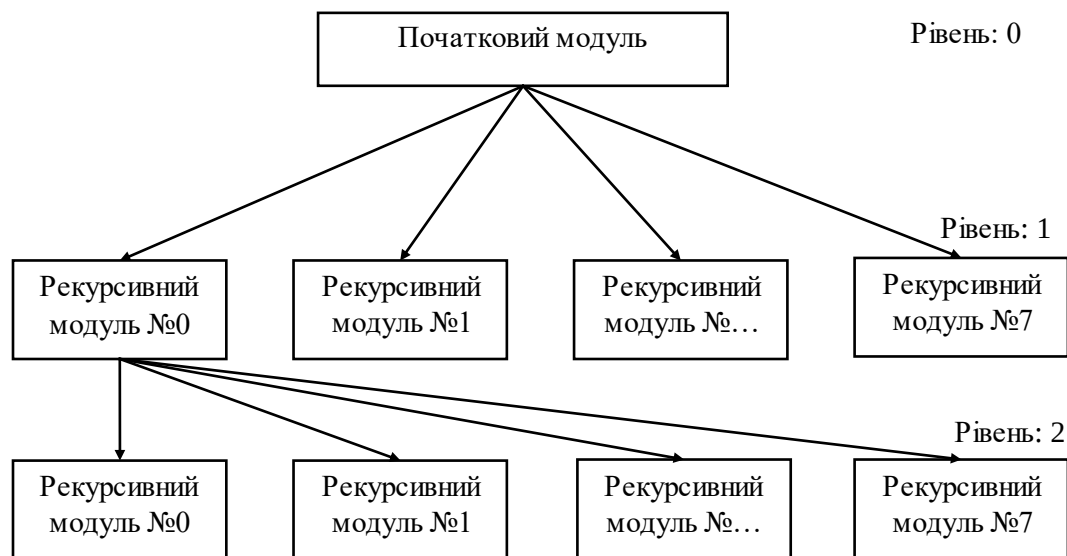


Схема 1.

Безпосередній приклад реалізації. Розглянемо детально схему функціонування керуючого простору і алгоритмічних модулів на прикладі матриць розмірності 8×8 .

Реалізація вимагає створення окремого веб-сервісу, який надає доступ до матриць, оскільки передбачається, що матриці не можуть бути повністю розміщені в оперативній пам'яті та потенційно знаходитися на іншому пристрої. Веб-сервіс має базовий функціонал для надання доступу до матриць:

CreateMatrix	Створення матриці зазначеного розміру і з заданим ім'ям
GetSubmatix	Отримання зазначеного фрагмента матриці з заданим ім'ям
SetSubmatrix	Задати значення фрагменту матриці

Таблиця 1

Розподіл даних. Початковий модуль (рівень 0 на схемі 1) отримує розміри матриць, добуток яких необхідно обчислити, а також вміє взаємодіяти з сервером-сховищем для запису

результатів (метод SetSubmatrix в таблиці 1). Початковий модуль формує 8 точок, формує для цих точок «посилання» (індекс початкового рядка, стовпця в матриці, а також кількість елементів після них) на частини матриць, які необхідно перемножити, та передає в них рекурсивний алгоритмічний модуль. Таким чином, формується рівень 1, на якому існують посилання на матриці, які вже мають розмірність 4×4 .

Отримавши посилання на матриці розрядності більш ніж 2×2 , модулі рівня 1 повторюють ті ж дії по розподіленню матриць, що й початковий модуль, ґрунтуючись на «посиланнях», що були ними отримані. Таким чином, вони формують модулі рівня 2.

Модулі рівня 2 отримують посилання на матриці розмірності 2×2 , а також необхідні фрагменти матриці з сервера-сховища (метод GetSubmatix в таблиці 1). Далі вони проводять обчислення добутку матриць і передають по каналах результати (матриці 2×2) в точку, що їх створила, рівня 1.

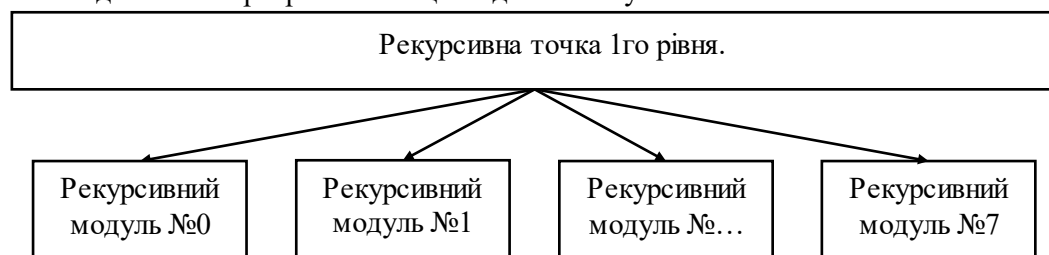


Схема 2

Рекурсивні модулі роздають завдання в строго заданому порядку. Рекурсивний модуль №0 (схема 2) отримує матриці з першого перемноження формули (1). Тобто, він отримає $A_{11}B_{11}$, а модуль під номером 1 одержить $A_{21}B_{21}$. Таким чином, сума результатів з 0 і 1 модулів буде результатом C_{11} . Сума модулів 2 та 3 — C_{12} , 4 і 5 — C_{21} , 6 і 7 — C_{22} . Результат C_{ij} на рівні 1 є однією матрицею розмірності 2×2 . Результати передаються на рівень 0 в тому ж порядку, в якому й обчислювались.

Рівень 0 збирає результати аналогічно рівню 1, однак очікує не одну матрицю 2×2 , а чотири, які по черзі підсумовуються між собою. Оскільки відправка і отримання підматриць відбувається в строго заданому порядку - не відбувається ні зберігання зайвого обсягу даних, ні помилкового підсумовування. Найкраще цей процес описується фрагментом коду:

```
for (int j = 0; j < getMatrixNumber(size); j++) {
    for (int i = 0; i < 8; i += 2) {
        var firstPart =
        (MatrixPart)points[i].GetByteArray();
        var secondpart =
        (MatrixPart)points[i+1].GetByteArray();
        firstPart.matr.Add(secondpart.matr); } }
```

Де getMatrixNumber (size) обчислює кількість очікуваних фрагментів для поточної розмірності 2×2 квадратної матриці. Даний код справедливий як для рекурсивного модуля, так і для початкового. Проте, в разі початкового

модуля результат кожної ітерації буде записуватися на сервер-сховище, а у випадку рекурсивного - передаватися в точку, що його породила. Збирати результати можна двома способами, представленими на схемі 2, де елемент матриці представляє порядок отримання.

$$\begin{pmatrix} 1 & 5 & 2 & 6 \\ 9 & 13 & 10 & 14 \\ 3 & 7 & 4 & 8 \\ 11 & 15 & 12 & 16 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 7 & 8 \\ 9 & 10 & 13 & 14 \\ 11 & 12 & 15 & 16 \end{pmatrix}$$

Схема 2

У першому випадку ми збираємо по одному елементу кожної частини матриці, у другому - ми спочатку повністю обчислюємо C_{11} , а потім C_{12}, C_{21}, C_{22} . У реалізації обраний саме перший метод, оскільки створення і запуск точок йде синхронно та саме в цій послідовності, а значить, швидше за все, результати будуть готові в такій же послідовності.

Отже, можна помітити, що управління процесом передається спочатку вниз, як показано на схемі 1, а потім вгору (схема 3). Таким чином, схема керуючого простору є двонаправленим графом, де вагою ребра може бути сумарна кількість фрагментів-результатів, які передаються ним при складанні результатів. Дане число можна представити у вигляді 4^M , где $M \in \mathbb{N}_0$. Складність цього алгоритму буде $O(n^3)$.

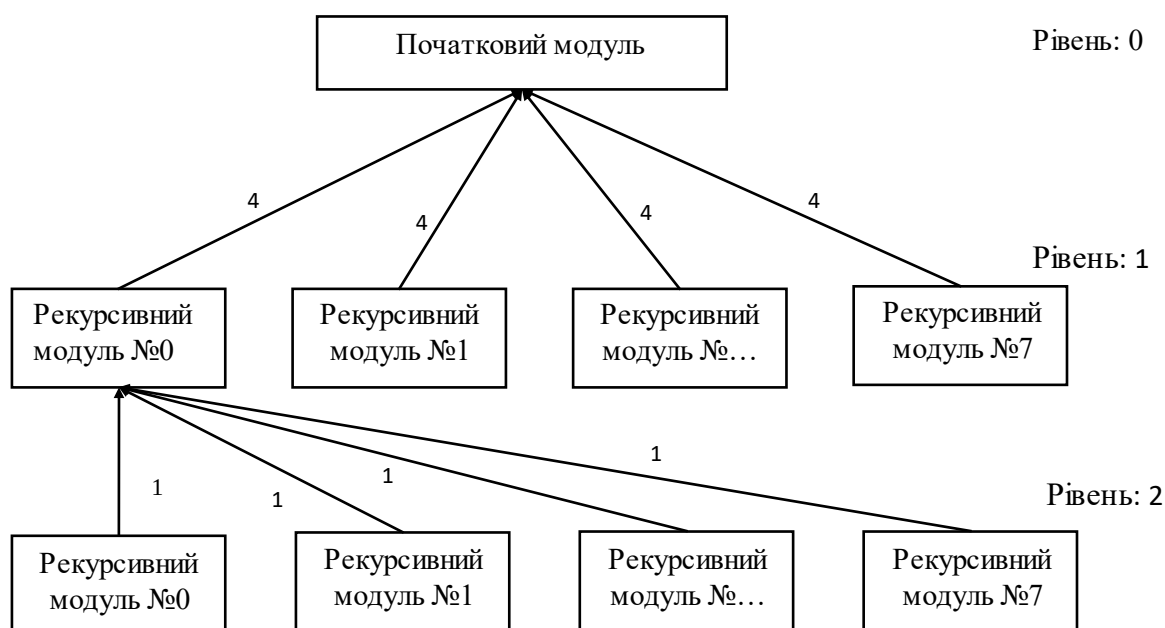


Схема 3

Висновки. Хоча наведена задача є скоріше штучної, проте вона показує широкі можливості застосування систем ПАРКС для вирішення паралельно-рекурсивних задач, як на окремих користувальницьких ПК з багатоядерними процесорами, так і на множині комп'ютерів,

об'єднаних локальною мережею. Подібні алгоритми можуть бути дуже ефективні при наявності множини пристроїв, які не можуть самостійно вирішувати складні й об'ємні завдання.

Список літератури

1. Анисимов А.В. Система ПАРУС-JAVA для паралельних вичислень на комп'ютерних сетях / Анисимов А.В., Дерев'янченко А.В. // Кибернетика и системный анализ. – 2005. – №1 – с. 25-36.
2. Анисимов А.В. Особенности ПАРУС-технологии / Анисимов А.В., Кулябко П.П. // Кибернетика и системный анализ – 1993. – № 3 – С. 128-137.
3. Федорус О.М. Системи ПАРКС як засіб реалізації хмарних обчислень. / Федорус О.М. // Матеріали II Міжнародної науково-практичної конференції «Інформаційні технології та взаємодії» – 2015. – с. 115-116.
4. S. CHEN Parallel recursive prediction error algorithm for training layered neural networks / S. CHEN, C.F.N. COWAN, S.A. BILLINGS & P.M. GRANT. // International Journal of Control – 1990. – 51 – 6.
5. L.-P. Chau Recursive algorithm for the discrete cosine transform with general lengths. / L.-P. Chau, W.-C. Siu. // Electronics Letters – 1994. – 30 – 3 – p. 197–198.
6. E. Elmroth Applying recursion to serial and parallel QR factorization leads to better performance / E. Elmroth, F. G. Gustavson. // IBM Journal of Research and Development – 2000. – 44 – 4 – p. 605– 624.
7. Дерев'янченко О.В. Моделювання паралельних програм за допомогою системи ПАРКС-JAVA / Дерев'янченко О.В. // Наукові записки НаУКМА, Комп'ютерні науки. – 2005. – Т.36. – с. 32-38.

References

1. ANISIMOV A., DEREVIANCHENKO A. (2005) PARCS-Java system for parallel computing on computer networks. *Cybernetics & System Analysis*. 2005(1) pp. 25-36.
2. ANISIMOV A., KULYABKO P. (1993) Features of PARCS-technology *Cybernetics & System Analysis*. 1993(3). pp. 128-137.
3. FEDORUS O. (2015) PARCS system as a tool for cloud computing. *Materials of the International Scientific and Practical Conference "Information Technologies and Interaction"*. pp. 115-116.
4. S. CHEN, C.F.N. COWAN, S.A. BILLINGS & P.M. GRANT.(1990) Parallel recursive prediction error algorithm for training layered neural networks *International Journal of Control*. 51(6).
5. L.-P. CHAU, W.-C. SIU. (1994) Recursive algorithm for the discrete cosine transform with general lengths. *Electronics Letters*. 30(3) – pp. 197 – 198.
6. E. ELMROTH, F.G. GUSTAVSON (2000) Applying recursion to serial and parallel QR factorization leads to better performance. *IBM Journal of Research and Development*. 44(4) – pp. 605– 624.
7. DEREVIANCHENKO A. (2005) Simulation of parallel programs using PARCS-Java system. *Scientific Notes of NaUKMA, Computer Science*. 36. pp. 32-38.

Надійшла до редколегії 19.03.2017

УДК 517.9

Шевчук Ю.М., аспірант

Моделі розповсюдження інформації з малим параметром

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4д,
e-mail: shevchuk.juli@ukr.net

I.M. Shevchuk, PhD. student

Mathematical models of information spreading process with small parameters

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: shevchuk.juli@ukr.net

У статті досліджується динамічна модель розповсюдження довільної кількості типів інформації із стаціонарними параметрами керувань для якої за допомогою методу малого параметру отримано наближений розв'язок. Також наведені умови за яких цей розв'язок буде обмежений та невід'ємний. Результати числового експерименту демонструють практичні можливості даної схеми.

Ключові слова: моделі розповсюдження інформації, стаціонарні параметри, малий параметр.

We consider mathematical model with stationary parameters of spreading any number of information type with external influences. The number of information made by each of the sides is taken as key parameter promoting accomplishment of aim. Information is spread in the community along internal (interpersonal communication of the member of social community) and external threads (mass media). The model takes the form of N (number of information channels) non-linear ordinary differential equations. A search analytical solution for these models is a difficult problem. The method of the small parameter is offered to search the approximation solutions of system of differential equations. In this work is shown the result of this approach. Special cases of presenting external influence are considered. Conditions of existence of a non-negative bounded solution are considered for general model. The offered model of information spreading process except theoretical interest has an important practical meaning. The innovation of this work is the approximation solutions of the model with stationary parameters of spreading any number of information channels with external influences.

Key words: models of information spreading process, stationary parameters, small parameter.

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

Вступ

Розглядається деяка соціальна група чисельністю L , на яку провадиться інформаційна дія по N каналах, причому число суб'єктів, що сприйняли інформацію k -го типу залежить як від зовнішньої дії, так і від спілкування суб'єктів між собою. Якщо позначимо через $x_k(t)$ число суб'єктів, що сприйняли інформацію k -го типу в момент t , через $b_k(t)$ – інтенсивність спілкування, $u_k(t)$ – зовнішні дії, то зміну з часом величини $x_k(t)$ можливо описати системою диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned} \dot{x}_k(t) &= b_k(t)x_k(t) \left(L - \sum_{i=1}^N x_i(t) \right) + u_k(t), \\ x_k(t_0) &= x_{0k} \geq 0, k = \overline{1, N}. \end{aligned} \quad (1)$$

В роботах [1] - [4] проводився аналіз рівнянь (1) при постійних параметрах і спеціальному виборі функцій $u_k(t)$. Аналіз властивостей розв'язків системи (1) при спеціальному виборі $u_k(t)$ проводився в роботі [5].

Аналіз загальної моделі

Розглянемо випадок зі стаціонарними параметрами, коли зовнішні впливи моделюються у такому вигляді

$$u_k(t) = \gamma x_k(t) + a_k \left(L - \sum_{i=1}^N x_i(t) \right), k = \overline{1, N}.$$

Тоді (1) набуде вигляду

$$\dot{x}_k(t) = (a_k + (b + \varepsilon b_k)x_k(t)) \times$$

$$\times \left(L - \sum_{i=1}^N x_i(t) \right) + \gamma x_k(t),$$

$$x_k(t_0) = x_{0k}, k = \overline{1, N}, \quad (2)$$

причому $\gamma \neq 0$.

Твердження 1. Нехай $x_k(t), k = \overline{1, N}$ розв'язки системи (2), тоді має місце представлення

$$x_k(t) = x_{k0}(t) + \varepsilon \int_{t_0}^t e^{\int_{\tau}^t (\gamma + by(s)) ds} \times$$

$$\times \left(b_k x_{k0}(\tau) y(\tau) - (a_k + b x_{k0}(\tau)) z(\tau) \right) d\tau +$$

$$+ o(\varepsilon), k = \overline{1, N},$$

де

$$x_{k0}(\tau) = x_{0k} e^{\int_{t_0}^{\tau} (by(q) + \gamma) dq} +$$

$$+ \int_{t_0}^{\tau} e^{\int_q^{\tau} (by(s) + \gamma) ds} a_k y(q) dq,$$

$$z(\tau) = \sum_{k=1}^N b_k \times$$

$$\times \int_{t_0}^{\tau} e^{\int_q^{\tau} (\hat{a} + 2by(s)) ds} y(q) x_{k0}(q) dq,$$

$$y(\tau) = \begin{cases} \bar{y}_1 + \frac{\sqrt{D}}{b} (1 - c_1 e^{\sqrt{D}\tau})^{-1}, D > 0, \\ \bar{y}_3 + (b\tau + c_2)^{-1}, D = 0, \\ \sqrt{-\frac{D}{4b}} tg \left(\tau \sqrt{-\frac{D}{4b}} \right) + \bar{y}_3 + c_3, D < 0, \end{cases}$$

$$\hat{a} = \gamma - bL - \sum_{k=1}^N a_k,$$

$$D = \hat{a}^2 + 4\gamma bL, \bar{y}_1 = -\frac{\hat{a} + \sqrt{D}}{2b},$$

$$\bar{y}_2 = -\frac{\hat{a} - \sqrt{D}}{2b}, \bar{y}_3 = -\frac{\hat{a}}{2b},$$

$$c_1 = e^{-\sqrt{D}t_0} \frac{L - \sum_{k=1}^N x_{0k} - \bar{y}_2}{L - \sum_{k=1}^N x_{0k} - \bar{y}_1},$$

$$c_2 = \left(\bar{y}_3 - L + \sum_{k=1}^N x_{k0}(t) \right)^{-1} - bt_0,$$

$$c_3 = L - \sum_{k=1}^N x_{0k} - \bar{y}_3 -$$

$$- \sqrt{-\frac{D}{4b}} tg \left(t_0 \sqrt{-\frac{D}{4b}} \right).$$

Доведення.

Представимо розв'язки системи (2) як

$$x_k(t) = x_{k0}(t) + \varepsilon x_{k1}(t) + o(\varepsilon), k = \overline{1, N},$$

тоді

$$x_{k0}(t) = x_k(t)|_{\varepsilon=0},$$

$$x_{k1}(t) = \left. \frac{dx_k(t)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0}, k = \overline{1, N}.$$

Звідси отримуємо дві системи диференціальних рівнянь

$$\dot{x}_{k0}(t) = (a_k + b x_{k0}(t)) y(t) + \gamma x_{k0}(t),$$

$$x_{k0}(t_0) = x_{0k}, k = \overline{1, N},$$

$$y(t) = L - \sum_{k=1}^N x_{k0}(t); \quad (3)$$

$$\dot{x}_{k1}(t) = -(a_k + b x_{k0}(t)) \sum_{i=1}^N x_{i1}(t) +$$

$$+ \gamma x_{k1}(t) + (b x_{k1}(t) + b_k x_{k0}(t)) y(t),$$

$$x_{k1}(t_0) = 0, k = \overline{1, N}. \quad (4)$$

Спочатку розглянемо більш детально систему (3). Для $y(t)$ отримаємо рівняння Рікатті

$$\dot{y}(t) = - \sum_{k=1}^N \frac{dx_{k0}(t)}{dt} =$$

$$= - \left(\sum_{k=1}^N a_k + b \sum_{k=1}^N x_{k0}(t) \right) y(t) -$$

$$- \gamma \sum_{k=1}^N x_{k0}(t) = b y^2(t) + \hat{a} y(t) - \gamma L, \quad (5)$$

з початковою умовою

$$y(t_0) = L - \sum_{k=1}^N x_{0k}.$$

Проаналізуємо дискримінант правої частини (5):

A1. Нехай $D > 0$. Тоді отримуємо рівняння

$$\dot{y}(t) = b(y - \bar{y}_1)(y - \bar{y}_2).$$

Його розв'язком буде

$$y(t) = \bar{y}_1 + \frac{\sqrt{D}}{b} \left(1 - c_1 e^{\sqrt{D}t}\right)^{-1},$$

де

$$c_1 = e^{-\sqrt{D}t_0} \frac{y(t_0) - \bar{y}_2}{y(t_0) - \bar{y}_1}.$$

A2. Нехай $D = 0$. Тоді отримуємо рівняння

$$\dot{y}(t) = b(y - \bar{y}_3)^2,$$

розв'язок якого є

$$y(t) = \bar{y}_3 - (bt + c_2)^{-1},$$

де

$$c_2 = (\bar{y}_3 - y(t_0))^{-1} - bt_0.$$

A3. Нехай $D < 0$. Тоді отримуємо рівняння

$$\dot{y}(t) = b \left[(y - \bar{y}_3)^2 - \left((\bar{y}_3)^2 + \frac{\gamma L}{b} \right) \right].$$

Оскільки

$$\bar{y}_3^2 + \frac{\gamma L}{b} < 0,$$

то

$$y(t) = \sqrt{-\frac{D}{4b}} t g \left(t \sqrt{-\frac{D}{4b}} \right) + \bar{y}_3 + c_3,$$

де

$$c_3 = y(t_0) - \bar{y}_3 - \sqrt{-\frac{D}{4b}} t g \left(t_0 \sqrt{-\frac{D}{4b}} \right).$$

Система диференціальних рівнянь (3) набуде вигляду

$$\dot{x}_{k0}(t) = (by(t) + \gamma)x_{k0}(t) + a_k y(t),$$

$$x_{k0}(t_0) = x_{0k}, k = \overline{1, N}.$$

За формулою Коші її розв'язок матиме вигляд

$$x_{k0}(t) = x_{0k} e^{\int_{t_0}^t (by(\tau) + \gamma) d\tau} + \int_{t_0}^t e^{\int_{\tau}^t (by(s) + \gamma) ds} a_k y(\tau) d\tau.$$

Тепер розглянемо систему (4), яку можна представити у вигляді

$$\dot{x}_{k1}(t) = -(a_k + bx_{k0}(t)) \sum_{i=1}^N x_{i1}(t) + \gamma x_{k1}(t) + (bx_{k1}(t) + b_k x_{k0}(t))y(t),$$

$$x_{k1}(t_0) = 0, k = \overline{1, N}.$$

Зробивши заміну

$$z(t) = \sum_{k=1}^N x_{k1}(t),$$

отримаємо

$$\dot{z}(t) = z(t)(\hat{a} + 2by(t)) + y(t) \sum_{k=1}^N b_k x_{k0}(t),$$

$$z(t_0) = \sum_{k=1}^N x_{k1}(t_0) = 0.$$

За формулою Коші

$$z(t) = z(t_0) e^{\int_{t_0}^t (\hat{a} + 2by(s)) ds} + \int_{t_0}^t e^{\int_{\tau}^t (\hat{a} + 2by(s)) ds} y(\tau) \sum_{k=1}^N b_k x_{k0}(\tau) d\tau = \sum_{k=1}^N b_k \int_{t_0}^t e^{\int_{\tau}^t (\hat{a} + 2by(s)) ds} y(\tau) x_{k0}(\tau) d\tau.$$

Отже, систему (4) можна представити як

$$\dot{x}_{k1}(t) = (\gamma + by(t))x_{k1}(t) + b_k x_{k0}(t)y(t) - (a_k + bx_{k0}(t))z(t),$$

$$x_{k1}(t_0) = 0, k = \overline{1, N}.$$

Розв'язки цієї системи $x_{k1}(t), k = \overline{1, N}$ за

формулою Коші матимуть вигляд

$$x_{k1}(t) = x_{k1}(t_0) e^{\int_{t_0}^t (\gamma + by(s)) ds} +$$

$$\begin{aligned}
 & + \int_{t_0}^t e^{\int_{\tau}^t (\gamma + b y(s)) ds} \times \\
 & \times (b_k x_{k0}(\tau) y(\tau) - (a_k + b x_{k0}(\tau)) z(\tau)) d\tau = \times (b_k x_{k0}(\tau) y(\tau) - (a_k + b x_{k0}(\tau)) z(\tau)) d\tau + \\
 & = \int_{t_0}^t e^{\int_{\tau}^t (\gamma + b y(s)) ds} \times + o(\varepsilon), k = \overline{1, N}. \\
 & \times (b_k x_{k0}(\tau) y(\tau) - (a_k + b x_{k0}(\tau)) z(\tau)) d\tau.
 \end{aligned}$$

Враховуючи наведене вище, розв'язки системи (2) можна представити у вигляді
 $x_k(t) = x_{k0}(t) + \varepsilon x_{k1}(t) + o(\varepsilon) =$

Твердження 2. Для того, щоб розв'язки системи (3)

$x_{k0}(t), k = \overline{1, N}, t \in [t_0, T],$
 задовольняли умову $x_{k0}(t) \in [0, L]$, необхідно, щоб параметри задовольняли умови для $k = \overline{1, N}$:

$$\left[\begin{aligned} & b > 0, \gamma < 0, \gamma + bL < 0, a_k > 0, \\ & b < 0, \gamma < 0, a_k > 0, \\ & \gamma < 0, a_k < 0, \hat{a} = 2 \left(\gamma \pm \sqrt{\gamma \sum_{k=1}^N a_k} \right), 0 \leq -\frac{\hat{a}}{2b} \leq L, \\ & x_{0k} \geq \max \left\{ \frac{a_k L}{\gamma} (e^{-\gamma(T-t_0)} - 1), \frac{a_k L}{bL + \gamma} (e^{-(bL + \gamma)(T-t_0)} - 1) \right\}, \\ & \max \left\{ \frac{a_k}{\gamma} (e^{-\gamma(T-t_0)} - 1), \frac{a_k}{bL + \gamma} (e^{-(bL + \gamma)(T-t_0)} - 1) \right\} \leq 1, \\ & \left[\begin{aligned} & b \left(\frac{1}{y(t_0) + \frac{\hat{a}}{2b}} + b t_0 \right) < 0, \\ & b \left(\frac{1}{y(t_0) + \frac{\hat{a}}{2b}} + b t_0 \right) > 0, \frac{1}{b \left(y(t_0) + \frac{\hat{a}}{2b} \right)} < 0. \end{aligned} \right. \end{aligned} \right. \quad (6)$$

Доведення. За постановкою задачі $y(t) = L - \sum_{k=1}^N x_{k0}(t)$ має задовольняти нерівностям:

$$0 \leq y(t) \leq L.$$

Нижче проведемо аналіз $y(t)$ в залежності від знаку дискримінанта D :

B1. При $D = \hat{a}^2 + 4\gamma bL > 0$ маємо:

$$y(t) = \bar{y}_1 + \frac{\sqrt{D}}{b} \frac{1}{1 - e^{\sqrt{D}(t-t_0)} \frac{y(t_0) - \bar{y}_1}{y(t_0) - \bar{y}_2}}.$$

Тоді $y(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \bar{y}_1$, отже повинно виконуватись

$$0 \leq \bar{y}_1 \leq L.$$

Провівши аналіз при яких значеннях параметрів виконується умова $0 \leq y(t)$, отримаємо такі області:

$$\left[\begin{aligned} & b > 0, \gamma < 0, \sum_{k=1}^N a_k > \gamma - bL, \\ & b < 0, \gamma > 0, \sum_{k=1}^N a_k < \gamma - bL, \\ & b < 0, \gamma < 0. \end{aligned} \right.$$

Знайдемо, коли буде виконуватись $\bar{y}_1 \leq L$:

B1.1 нехай $b > 0, \gamma < 0, \hat{a} < 0$, тоді маємо таку послідовність перетворень

$$\begin{aligned}
 & \bar{y}_1 \leq L; \\
 & -\hat{a} - \sqrt{\hat{a}^2 + 4\gamma bL} < 2bL; \\
 & \sqrt{(\hat{a} + 2bL)^2 + 4\gamma bL - 4\hat{a}bL - 4b^2L^2} > \\
 & > -(\hat{a} + 2bL); \\
 & \begin{cases} \hat{a} + 2bL < 0, \\ 4bL(\gamma - \hat{a} - bL) > 0; \end{cases}
 \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \gamma + bL - \sum_{k=1}^N a_k < 0, \\ \gamma - \hat{a} - bL > 0; \\ \gamma + bL < \sum_{k=1}^N a_k, \\ \sum_{k=1}^N a_k > 0. \end{cases}$$

Остаточно отримаємо таку сукупність умов для цього випадку

$$\begin{cases} b > 0, \gamma < 0, \sum_{k=1}^N a_k > 0, \\ \sum_{k=1}^N a_k > \gamma + bL. \end{cases} \quad (7)$$

B1.2 нехай $b < 0, \gamma > 0, \hat{a} > 0$, тоді

$$\begin{aligned} & \bar{y}_1 \leq L; \\ & -\hat{a} - \sqrt{\hat{a}^2 + 4\gamma bL} > 2bL; \\ & \begin{cases} \hat{a} + 2bL < 0, \\ 4bL(\gamma - \hat{a} - bL) < 0; \end{cases} \\ & \begin{cases} \gamma + bL - \sum_{k=1}^N a_k < 0, \\ \gamma - \hat{a} - bL > 0; \end{cases} \\ & \begin{cases} \gamma + bL < \sum_{k=1}^N a_k, \\ \sum_{k=1}^N a_k > 0. \end{cases} \end{aligned}$$

В даному випадку отримуємо

$$\begin{cases} b < 0, \gamma > 0, \sum_{k=1}^N a_k > 0, \\ \gamma + bL < \sum_{k=1}^N a_k < \gamma - bL. \end{cases} \quad (8)$$

B1.3 нехай $b < 0, \gamma < 0$ та

$$\bar{y}_1 \leq L,$$

тоді

$$\begin{cases} \gamma + bL < \sum_{k=1}^N a_k, \\ \sum_{k=1}^N a_k > 0. \end{cases}$$

Оскільки $b < 0, \gamma < 0$ та $\gamma + bL < 0$, то можна записати сукупність умов для третього випадку

$$b < 0, \gamma < 0, \sum_{k=1}^N a_k > 0. \quad (9)$$

B2. При $D = 0$ отримуємо гіперболу

$$y(t) = \bar{y}_3 - (b(t - t_0) + (y(t_0) - \bar{y}_3)^{-1})^{-1}.$$

Розв'язок

$$y(t) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \bar{y}_3,$$

якщо будуть виконуватись умови

$$\begin{cases} b((y(t_0) - \bar{y}_3)^{-1} + bt_0) < 0, \\ b((y(t_0) - \bar{y}_3)^{-1} + bt_0) > 0, \\ (by(t_0) - b\bar{y}_3)^{-1} < 0. \end{cases}$$

При $0 \leq \bar{y}_3 \leq L$, отримаємо

$$\begin{cases} \hat{a} = 2 \left(\gamma \pm \sqrt{\gamma \sum_{k=1}^N a_k} \right), \\ \gamma \sum_{k=1}^N a_k > 0, \\ 0 \leq \bar{y}_3 \leq L, \\ \begin{cases} b((y(t_0) - \bar{y}_3)^{-1} + bt_0) < 0, \\ b((y(t_0) - \bar{y}_3)^{-1} + bt_0) > 0, \\ (by(t_0) - b\bar{y}_3)^{-1} < 0. \end{cases} \end{cases} \quad (10)$$

C1. Оцінимо $x_{k0}(t), k = \overline{1, N}$, розглянувши рівняння

$$\dot{x}_{k0} = (by(t) + \gamma)x_{k0}(t) + a_k y(t).$$

Враховуючи, що $0 \leq y(t) \leq L$, отримуємо випадки:

C1.1 нехай $b > 0, a_k > 0$, (5.1, 5.4), що задовольняє умови (7) та (10), тоді

$$\begin{aligned} \gamma x_{k0}(t) & \leq \dot{x}_{k0} \leq \\ & \leq (bL + \gamma)x_{k0}(t) + a_k L, k = \overline{1, N}, \end{aligned}$$

і в силу леми Гроноулла-Беллмана [6] будемо мати

$$0 \leq x_{0k} e^{\gamma(t-t_0)} \leq x_{k0}(t) \leq$$

$$\leq e^{(bL+\gamma)(t-t_0)} \left(x_{0k} + \frac{a_k L}{bL + \gamma} \right) - \frac{a_k L}{bL + \gamma}.$$

Права частина буде обмежена, якщо $\gamma < 0$. Ця область міститься в (7), але для (10) порушується умова

$$\gamma \sum_{k=1}^N a_k > 0,$$

і тому в (10) її доречно замінити на

$$\begin{cases} \gamma < 0, \\ \sum_{k=1}^N a_k < 0. \end{cases}$$

Також до (7) додається умова $bL + \gamma < 0$.

C1.2 нехай $b > 0, a_k < 0$, то, з врахуванням (10), справджуються нерівності

$$\begin{aligned} \gamma x_{k0}(t) + a_k L & \leq \dot{x}_{k0} \leq \\ & \leq (bL + \gamma)x_{k0}(t), k = \overline{1, N}, \\ e^{\gamma(t-t_0)} \left(x_{0k} + \frac{a_k L}{\gamma} \right) - \frac{a_k L}{\gamma} & \leq x_{k0}(t) \leq \\ & \leq x_{0k} e^{(bL+\gamma)(t-t_0)}, k = \overline{1, N}. \end{aligned}$$

Права частина останньої нерівності буде обмежена за умови $bL + \gamma < 0$, що задовольняє (10). Ліва частина також обмежена в силу $\gamma < 0$, тому справджується

$$\min_{t \in [t_0, T]} \left(e^{\gamma(t-t_0)} \left(x_{0k} + \frac{a_k L}{\gamma} \right) - \frac{a_k L}{\gamma} \right) = e^{\gamma(T-t_0)} \left(x_{0k} + \frac{a_k L}{\gamma} \right) - \frac{a_k L}{\gamma}, k = \overline{1, N}.$$

Отже

$$e^{\gamma(T-t_0)} \left(x_{0k} + \frac{a_k L}{\gamma} \right) - \frac{a_k L}{\gamma} \leq x_{k0}(t), k = \overline{1, N}.$$

Користуючись такими міркуваннями, до (10) додаються умови

$$x_{0k} \geq \frac{a_k L}{\gamma} (e^{-\gamma(T-t_0)} - 1),$$

$$\frac{a_k}{\gamma} (e^{-\gamma(T-t_0)} - 1) \leq 1, k = \overline{1, N}.$$

С1.3 нехай $b < 0, a_k > 0$, (5.2, 5.3) то, враховуючи (8) та (9), отримуємо

$$(bL + \gamma)x_{k0}(t) \leq \dot{x}_{k0} \leq \gamma x_{k0}(t) + a_k L, k = \overline{1, N},$$

$$0 \leq x_{0k} e^{(bL+\gamma)(t-t_0)} \leq x_{k0}(t) \leq e^{\gamma(t-t_0)} \left(x_{0k} + \frac{a_k L}{\gamma} \right) - \frac{a_k L}{\gamma}, k = \overline{1, N}.$$

Права частина останньої нерівності буде обмежена, якщо $\gamma < 0$, що не задовольняє (8), й тому (8) не можна віднести до необхідних умов додатності та обмеженості розв'язків системи (3), $x_{k0}(t), k = \overline{1, N}$.

С1.4 нехай $b < 0, a_k < 0$, що задовольняють (10), то

$$(bL + \gamma)x_{k0}(t) + a_k L \leq \dot{x}_{k0} \leq \gamma x_{k0}(t), k = \overline{1, N},$$

$$e^{(bL+\gamma)(t-t_0)} \left(x_{0k} + \frac{a_k L}{bL + \gamma} \right) - \frac{a_k L}{bL + \gamma} \leq x_{k0}(t) \leq x_{0k} e^{\gamma(t-t_0)}, k = \overline{1, N}.$$

Оскільки $\gamma < 0$, то ліва і права частини обмежені. Знаходимо

$$\min_{t \in [t_0, T]} \left(e^{(bL+\gamma)(t-t_0)} \left(x_{0k} + \frac{a_k L}{bL + \gamma} \right) - \frac{a_k L}{bL + \gamma} \right) = e^{(bL+\gamma)(T-t_0)} \left(x_{0k} + \frac{a_k L}{bL + \gamma} \right) - \frac{a_k L}{bL + \gamma}, k = \overline{1, N}.$$

Тоді

$$e^{(bL+\gamma)(T-t_0)} \left(x_{0k} + \frac{a_k L}{bL + \gamma} \right) - \frac{a_k L}{bL + \gamma} \leq x_{k0}(t), k = \overline{1, N}.$$

Тому до (10) додаються умови

$$x_{0k} \geq \frac{a_k L}{bL + \gamma} (e^{-(bL+\gamma)(T-t_0)} - 1), k = \overline{1, N},$$

$$\frac{a_k}{bL + \gamma} (e^{-(bL+\gamma)(T-t_0)} - 1) \leq 1, k = \overline{1, N}.$$

Також потрібно врахувати, що в кожному з розглянутих випадків вимагається однаковий знак для $a_k, k = \overline{1, N}$, й тому замість умови $\sum_{k=1}^N a_k > 0$ вимагається більш жорсткі умови $a_k > 0, k = \overline{1, N}$. Аналогічно, $\sum_{k=1}^N a_k < 0$ замінюється на $a_k < 0, k = \overline{1, N}$.

Отримуємо необхідні умови (6) додатності та обмеженості розв'язків системи (3), $x_{k0}(t), k = \overline{1, N}$, що й треба було показати.

Наслідок. На довільному скінченному проміжку $[t_0, T]$ існує таке ε , що коли $x_{k0}(t) \in [0, L]$, то й $x_k(t) \in [0, L]$ з точністю до ε .

2. Аналіз моделі з керуванням специфічного вигляду

Розглянемо окремий випадок (1), коли $N=2$, а зовнішні керування набувають вигляду

$$u_k(t) = \gamma(x_k(t) - m_k L)x_k(t) + a_k(L - x_1 - x_2(t)),$$

$$m_1 + m_2 = 1, m_k \geq 0, k = 1, 2.$$

Тоді отримуємо систему

$$\dot{x}_k = (a_k + (b + \varepsilon b_k)x_k(t)) \times (L - x_1(t) - x_2(t)) + \gamma(x_k(t) - m_k L),$$

$$x_k(t_0) = x_{0k}, k = 1, 2. \quad (11)$$

Твердження 3. Нехай $x_k(t), k = 1, 2$, розв'язки системи (6), тоді має місце представлення

$$x_k(t) = x_{k0}(t) + \varepsilon \int_{t_0}^t e^{\gamma(t-\tau)} \left[\frac{\hat{a} - b\gamma(t_0)e^{\hat{a}(\tau-2t_0)}}{\hat{a} - b\gamma(t_0)e^{\hat{a}(\tau-2t_0)}} \right] e^{\hat{a}t_0} \times (b_k \gamma(\tau)x_{k0}(\tau) - (a_1 + b x_{k0}(\tau))z(\tau)) d\tau + o(\varepsilon), k = \overline{1, N},$$

де

$$x_{k0}(t) = x_{0k} e^{((\gamma - \hat{a}e^{\hat{a}t_0})t - \gamma t_0)} \times \left[\frac{\hat{a} - b\gamma(t_0)e^{-\hat{a}t_0}}{\hat{a}e^{-\hat{a}t} - b\gamma(t_0)e^{-2\hat{a}t_0}} \right] e^{\hat{a}t_0} + \int_{t_0}^t \left(\frac{a_k \hat{a} \gamma(t_0)}{\hat{a}e^{-\hat{a}(\tau-t_0)} - b\gamma(t_0)e^{-\hat{a}t_0}} - \gamma m_k L \right) \times e^{\gamma(t-\tau)} \left[\frac{\hat{a} - b\gamma(t_0)e^{\hat{a}(\tau-2t_0)}}{\hat{a} - b\gamma(t_0)e^{\hat{a}(\tau-2t_0)}} \right] e^{\hat{a}t_0} d\tau, k = 1, 2,$$

$$z(t) = \int_{t_0}^t e^{\hat{a}(t-\tau)} \times$$

$$\times \left[\frac{\hat{a} - by(t_0)e^{\hat{a}(\tau-2t_0)}}{\hat{a} - by(t_0)e^{\hat{a}(t-2t_0)}} \right]^{2e^{\hat{a}t_0}} \times$$

$$\times (b_1x_{10}(\tau) + b_2x_{20}(\tau))d\tau,$$

$$y(t) = \frac{\hat{a}y(t_0)}{\hat{a}e^{-\hat{a}(t-t_0)} - by(t_0)e^{-\hat{a}t_0}},$$

$$y(t_0) = L - x_{01} - x_{02}.$$

Доведення. Представимо розв'язки системи (11) як

$$x_k(t) = x_{k0}(t) + \varepsilon x_{k1}(t) + o(\varepsilon), k = 1, 2,$$

тоді

$$x_{k0}(t) = x_k(t)|_{\varepsilon=0},$$

$$x_{k1}(t) = \left. \frac{dx_k(t)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0}, k = 1, 2.$$

Отримуємо дві системи рівнянь

$$\dot{x}_{k0}(t) = (a_k + bx_{k0}(t)) \times$$

$$\times (L - x_{10}(t) - x_{20}(t)) + \gamma(x_{k0}(t) - m_k L),$$

$$x_{k0}(t_0) = x_{01}, k = 1, 2, \quad (12)$$

$$\dot{x}_{k1}(t) = -(a_k + bx_{k0}(t))(x_{11}(t) + x_{21}(t)) +$$

$$+ \gamma x_{k1}(t) + (bx_{k1}(t) + b_2x_{k0}(t)) \times$$

$$\times (L - x_{10}(t) - x_{20}(t)),$$

$$x_{k1}(t_0) = 0, k = 1, 2, \quad (13)$$

Спочатку розглянемо систему (12), зробимо для неї заміну

$$y(t) = L - x_{10}(t) - x_{20}(t),$$

$$y(t_0) = L - x_{01} - x_{02},$$

в результаті чого отримаємо диференційне рівняння

$$\dot{y}(t) = -(a_1 + a_2 + b(x_{10}(t) + x_{20}(t))) \times$$

$$\times (L - x_{10}(t) - x_{20}(t)) -$$

$$- \gamma(x_{10}(t) + x_{20}(t) - L).$$

Оскільки

$$\hat{a} = \gamma - bL - a_1 - a_2,$$

то отримаємо рівняння Ріккати

$$\frac{dy(t)}{dt} = \hat{a}y(t) + by^2(t),$$

розв'язок якого буде наступний

$$y(t) = \frac{\hat{a}y(t_0)}{\hat{a}e^{-\hat{a}(t-t_0)} - by(t_0)e^{-\hat{a}t_0}}.$$

Тоді система (12) набуває вигляду

$$\dot{x}_{k0}(t) = (\gamma + by(t))x_{k0}(t) + a_k y(t) - \gamma m_k L,$$

$$x_{k0}(t_0) = x_{01}, k = 1, 2,$$

і її розв'язки можна представити у вигляді

$$x_{k0}(t) = x_{0k} e^{\int_{t_0}^t (by(\tau) + \gamma) d\tau} +$$

$$+ \int_{t_0}^t e^{\int_{\tau}^t (by(s) + \gamma) ds} \times$$

$$\times (a_k y(\tau) - \gamma m_k L) d\tau, k = 1, 2.$$

Підставивши безпосередньо $y(t)$, отримаємо

$$x_{k0}(t) = x_{0k} e^{((\gamma - \hat{a}e^{\hat{a}t_0})t - \gamma t_0)} \times$$

$$\times \left[\frac{\hat{a} - by(t_0)e^{-\hat{a}t_0}}{\hat{a}e^{-\hat{a}t} - by(t_0)e^{-\hat{a}t_0}} \right]^{e^{\hat{a}t_0}} +$$

$$+ \int_{t_0}^t \left(\frac{a_k \hat{a} y(t_0)}{\hat{a}e^{-\hat{a}(\tau-t_0)} - by(t_0)e^{-\hat{a}t_0}} - \gamma m_k L \right) \times$$

$$\times e^{\gamma(t-\tau)} \left[\frac{\hat{a} - by(t_0)e^{\hat{a}(\tau-2t_0)}}{\hat{a} - by(t_0)e^{\hat{a}(t-2t_0)}} \right]^{e^{\hat{a}t_0}} d\tau, k = 1, 2.$$

Тепер розглянемо систему (13). Зробивши заміну

$$z(t) = x_{11}(t) + x_{21}(t), z(t_0) = 0,$$

отримуємо лінійне неоднорідне диференційне рівняння

$$\dot{z}(t) = (2by(t) + \hat{a})z(t) +$$

$$+ y(t)(b_1x_{10}(t) + b_2x_{20}(t)).$$

Його розв'язком буде

$$z(t) = \int_{t_0}^t e^{\hat{a}(t-\tau)} \times$$

$$\times \left[\frac{\hat{a} - by(t_0)e^{\hat{a}(\tau-2t_0)}}{\hat{a} - by(t_0)e^{\hat{a}(t-2t_0)}} \right]^{2e^{\hat{a}t_0}} \times$$

$$\times (b_1x_{10}(\tau) + b_2x_{20}(\tau))d\tau.$$

В результаті отримуємо таку систему диференціальних рівнянь

$$\dot{x}_{k1}(t) = x_{k1}(t)(by(t) + \gamma) +$$

$$+ b_k y(t)x_{k0}(t) - (a_k + bx_{k0}(t))z(t),$$

$$x_{k1}(t_0) = 0, k = 1, 2.$$

Її розв'язком буде

$$x_{k1}(t) = \int_{t_0}^t e^{\gamma(t-\tau)} \times$$

$$\times (b_k y(\tau)x_{k0}(\tau) - (a_1 + bx_{k0}(\tau))z(\tau)) \times$$

$$\times \left[\frac{\hat{a} - by(t_0)e^{\hat{a}(\tau-2t_0)}}{\hat{a} - by(t_0)e^{\hat{a}(t-2t_0)}} \right]^{e^{\hat{a}t_0}} d\tau, k = 1, 2.$$

З вище наведеного розв'язки системи (11) можна представити у вигляді

$$x_k(t) = x_{k0}(t) + \varepsilon x_{k1}(t) + o(\varepsilon) =$$

$$= x_{k0}(t) + \varepsilon \int_{t_0}^t e^{\gamma(t-\tau)} \times$$

$$\times (b_k y(\tau) x_{k0}(\tau) - (a_1 + b x_{k0}(\tau)) z(\tau)) \times \\ \times \left[\frac{\hat{a} - b y(t_0) e^{\hat{a}(\tau - 2t_0)}}{\hat{a} - b y(t_0) e^{\hat{a}(t - 2t_0)}} \right] e^{\hat{a}t_0} d\tau, k = 1, 2,$$

що і треба було довести.

3. Результати комп'ютерного експерименту

В якості прикладу наведемо результати комп'ютерного моделювання динаміки числа прихильників певного типу інформації.

Нехай є певна спільнота чисельністю $L = 100$ осіб, що піддається впливу певного інформаційного потоку. Тоді в момент часу $t \in [0, T]$ ту частину спільноти, що піддалась впливу, засвоїли трансльовану інформацію, позначимо через $x(t)$.

Припускається, що інформація розповсюджується по двом інформаційним каналам:

1) *Міжособове спілкування членів спільноти.* Кожен, хто засвоїв інформаційне повідомлення, починає впливати на неохоплених членів. Суттєвим тут є те, як часто він ділиться своєю інформацією і наскільки вона є правдоподібною. Представимо цей вплив через параметр $\tilde{b}$.

2) *Зовнішній по відношенню до спільноти інформаційний вплив.* Його характеристиками є частота трансльовання повідомлення, наскільки воно правдоподібне та резонансне. Представимо цей вплив через параметри α та γ .

Процес розповсюдження інформації в соціумі можна представити за допомогою задачі Коші

$$\dot{x}(t) = (a - \tilde{b}x(t))(L - x(t)) - \gamma x(t), \\ x(0) = x_0.$$

За допомогою заміни

$$\tilde{x}(t) = x(t)/L,$$

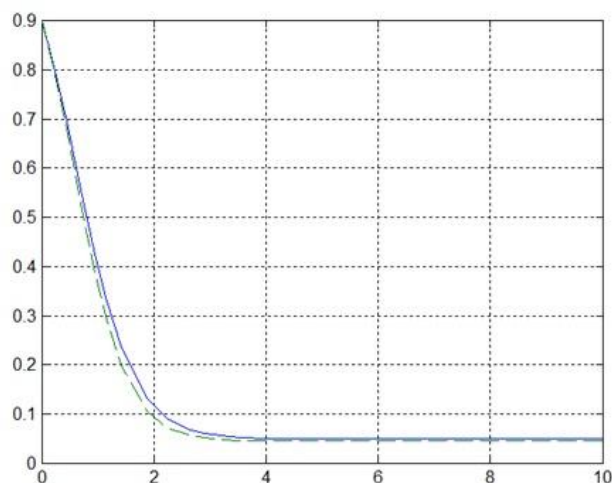
Зводимо до безрозмірного вигляду. Тоді

$$\tilde{x}'(t) = (a - L\tilde{b}\tilde{x}(t))(1 - \tilde{x}(t)) - \gamma\tilde{x}(t), \\ \tilde{x}(0) = x_0/L.$$

Нехай $a = 0.1$, $\tilde{b} = -0.00018$ та $\gamma = -0.25$, й на момент $t = 0$ в спільноті $x_0 = 90$ прихильників даного типу інформації. Процес розповсюдження інформації при такій постановці задачі можна представити у вигляді моделі

$$\tilde{x}'(t) = (0.1 - L\tilde{b}\tilde{x}(t))(1 - \tilde{x}(t)) - 0.25\tilde{x}(t), \\ x(0) = 0.9. \quad (14)$$

Тоді можна дослідити динаміку системи (14), користуючись методом малого параметра, представивши $L\tilde{b} = b + \varepsilon b_1 = -0.02 + 0.01 \times \times 0.2 = -0.018$ (Мал. 1).



Мал. 1. Динаміка системи (14) при $L\tilde{b} = b + \varepsilon b_1 = -0.02 + 0.01 \cdot 0.2 = -0.018$, де суцільною лінією зображено $x(t)$, а пунктирною – асимптотику нульового наближення.

Висновки

Побудовані наближені аналітичні розв'язки, отримані за допомогою методу малого параметра, для моделі розповсюдження довільної кількості типів інформації, а також окремого випадку, що характеризується спеціальним виглядом зовнішнього керування. Також встановлено умови існування невід'ємних обмежених розв'язків для загальної системи. На основі наведеного комп'ютерного експерименту можна говорити про наявну практичну цінність отриманих результатів.

Список використаних джерел

1. Михайлов А. П. Модели информационной борьбы / Михайлов А.П., Маревцева Н.А. // Математическое моделирование. – 2011. – №10. – С. 19–32.
2. Михайлов А. П. Развитие модели распространения информации в социуме/ Михайлов А.П., Петров А.П., Маревцева Н.А., Третьякова И.В.// Математическое моделирование. – 2014. – №3 (26). – С. 65–74.
3. Михайлов А.П. Моделирование периодических дестабилизирующих воздействий при информационном противоборстве в социуме/ Михайлов А.П., Петров А.П., Прончева О.Г., Прончев Г.Б., Маревцева Н.А.// Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. – 2016. – №16. – 13 с. – Режим доступу: <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-16>.
4. Наконечний О.Г. Задачі протиборства в системах з динамікою Гомперца / Наконечний О. Г., Зінко П. М.// Журнал обчислювальної та прикладної математики. – 2015. – №3 (120). – С.50–60.
5. Наконечний О.Г. Математична модель розповсюдження інформації з нестационарними параметрами / Наконечний О. Г., Шевчук Ю.М.//Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка Серія фізико-математичні науки. – 2016. – №3. – С.98–105.
6. Демидович Б.П. Лекции по математической теории устойчивости / Демидович Б.П. – Москва: Издательство "Наука", 1967. – 472 с.

References

1. MIKHAILOV, A.P. & MAREVTSEVA, N.A. (2011) Models of information confrontation. *Mat. Model.* (10). pp.19–32.
2. MIKHAILOV, A.P., PETROV, A.P., MAREVTSEVA, N.A. & TRETIKOVA, I. V. (2014) Development of a model of information dissemination in society. *Mat. Model.* 26(3). pp. 65–74.
3. MIKHAILOV, A.P., PETROV, A.P., PRONCHEVA, A.P., PRONCHEV, G.B. & MAREVTSEVA, N.A. (2016) Modeling of periodic destabilizing effect on information warfare in a society. *Preprint Keldysh Institute of Applied Mathematics.* (16). Available at: <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-16>.
4. NAKONECHNY, O.G. & ZINKO, P.M. (2015) Confrontation problems with the dynamics Gompertzian systems. *Journal of Computational&Applied Mathematics.* 120 (3). pp. 50–60.
5. NAKONECHNY, O.G. & SHEVCHUK, I.M. (2016) Mathematical model of information spreading process with non-stationary parameters. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kiev Series Physics&Mathematics.* (3). pp.98–105.
6. DEMIDOVICH, B.P. (1967) Lectures on the mathematical theory of stability. Moscow: Nauka.

Надійшла до редколегії 05.04.2017

РАДІОФІЗИКА

УДК 537.60

Натаров Р. М.¹, студ.
Судаков О. О., к.ф.-м.н., доц.
Радченко С. П., к.ф.-м.н., доц.

Компенсация просторової неоднорідності розподілу магнітного поля у магніторезонансній системі

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ,
вул. Володимирська, 64/13,
e-mail: ¹natarovx@gmail.com.

R. M. Natarov¹, Stud.
O. O. Sudakov, PhD.
S. P. Radchenko, PhD.

Compensation of magnetic field spatial heterogeneity in magnetic resonance imaging system

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska str., 64/13,
e-mail: ¹natarovx@gmail.com.

Пропонується методика синтезу простої шимуючої системи постійного магніту для потреб магнітно-резонансної томографії. Методика базується на нівелюванні другого порядку неоднорідності у заданій площині. Система реалізована за допомогою двох квадратних котушок. Для автоматизованого розрахунку параметрів котушок було розроблено програмний засіб. Ефективність запропонованої шимуючої системи підтверджено за допомогою комп'ютерної симуляції. Досягнуто неоднорідність коректованого магнітного поля 0,1 мТл у області розміром 20 мм, чого достатньо для створення магніторезонансної томографічної лабораторної установки.

Ключові слова: магнітно-резонансна томографія, неоднорідність, активне шимування, котушки.

The initial homogeneity of any MRI system's magnet is away from ideal specifications levels. The synthesis technique for a simple permanent magnet shimming system of magnetic resonance equipment is proposed. The previously obtained magnetic field distribution was applied to identify unwanted components in the inhomogeneous field. The technique is based on an active shimming, where currents are directed through specialized coils to improve homogeneity further. We focus on reduction of the second order magnetic field heterogeneity term in a specified plane. For each unwanted component in the uncorrected magnetic field, a carefully controlled supplemental magnetic field is generated for minimizing the number of coils. The system may be implemented with only two square coils. The author's software for automated calculation of the coils' parameters for neutralization and cancellation of the magnetic field error was developed. Computer simulations confirmed the efficiency of proposed system. The achieved inhomogeneity of corrected magnetic field is 0.1 mT within the area of $20 \times 10 \times 10 \text{ mm}^3$ is enough for construction of laboratory training magnetic resonance imaging setup. Proposed technique also can be applied for reducing the higher terms of magnetic field inhomogeneity.

Keywords: magnetic resonance imaging, magnetic field, inhomogeneity, active shimming, coils.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов І. О.

Introduction. Today magnetic resonance imaging (MRI) is one of the leading methods for noninvasive diagnostic of living objects. This method is based on the nuclear magnetic resonance phenomenon i.e. sampling the electromagnetic response of atomic nuclei in the superposition of oscillating and static magnetic fields. The main component of magnetic resonance (MR) scanner is the polarizing magnet that provides a highly-homogeneous static magnetic field. This magnet regardless of type (permanent, resistive, superconducting), has magnetic field inhomogeneity, which leads to a distortion of a reconstructed image

pixels' values and spatial distribution. Decreasing of the field's inhomogeneity leads to decrease the effective spin-spin relaxation time that affects signal attenuation, broadening of spectral lines and deterioration of resolution in turn [1]. A spatial distortion rises from the fact that signal's frequency obtained from the certain object's regions in the inhomogeneous magnetic field does not correspond to the expected frequency of excitation radio pulse, phase and frequency encoding. To avoid such distortion the inhomogeneity of static magnetic field B_0 in the magnet's volume should be about 10^{-5} T [2].

Creation of large magnets with a specified level of inhomogeneity is a very difficult task. For correcting of the field's inhomogeneity passive and active shimming approaches are used. Passive shimming is performed by the placing of ferromagnetic plates inside the MRI system. This method has significant drawbacks: changing the magnetic properties of ferromagnetic under the influence of temperature and the impossibility of adjusting irregularities caused by the patient's body during his MR study. The idea of active shimming is in placing of coils with specific form and current inside the magnet for creation of magnetic field that compensates the inhomogeneity of B_0 field. The problem of shimming coils synthesis for known field distribution is fairly nontrivial. Several practical methods [3, 4] for synthesis of shimming coils exist. In this paper we simulated the shimming system (SS) for a permanent magnet with a high magnetic field inhomogeneity that is comparable with the magnetic field itself.

Methods. The permanent magnet (Fig. 1) has two poles with diameter and the distance between them – 7 cm. Magnetic field induction in center is 250 mT. The magnetic field distribution between the poles of the magnet is assumed to have an axial symmetry that was proved by measurements [5]. The proposed SS consists of two square coils placed inside the magnet (Fig. 1.) Square coils' form was chosen for development simplicity. According to [5] the distribution of the magnetic field is:

$$B_M = 245.703 - 0.11x - 0.23z - 0.01xz - 0.04x^2 + 0.08z^2, \quad (1)$$

the field's induction is in mT, coordinates – in mm. The center of the coordinate system (CS) does not match the isocenter of the magnet. Thus displacement of the CS was applied. After that (1) was transformed to:

$$B_M = 245.634 - 0.01xz - 0.04x^2 + 0.08z^2. \quad (2)$$

The final field distribution along Z axis is:

$$B_{Mz} = 245.634 + 0.08z^2. \quad (3)$$

The inhomogeneity along Z axis is described by the second order polynomial:

$$B_{Sz} = B_S^{(0)} - 0.08z^2 \quad (4)$$

So the compensation coils should provide the corresponding special magnetic field dependence.

The value of the coefficient $B_S^{(0)}$ is not essential.

The field distribution of the single coil is the superposition of fields from four rectilinear wires with finite length. For simplicity the diameter of wires considers infinitesimal. Applying the Biot-Savart-Laplace law gives wire's spatial field distribution:

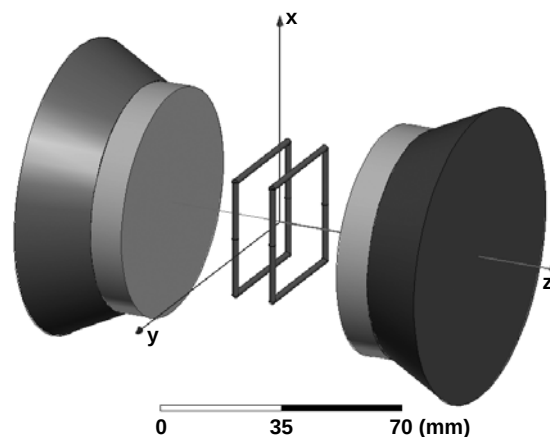


Fig. 1. Relative position of the magnet and coils

$$B_1 = I\mu_0\mu_0 (\cos\varphi_1 - \cos\varphi_2) / 4\pi r_0, \quad (5)$$

where r_0 – distance from point to wire, φ_1, φ_2 – angles between direction of current I and lines, that connect ends of the wire and spatial point. For the wire of length $2b$ and the spatial point equidistant to the wire's ends (Fig. 2) (5) can be rewritten:

$$B_2 = \frac{I\mu_0\mu_0 b}{2\pi r_0 \sqrt{b^2 + r_0^2}}. \quad (6)$$

Thus the magnetic field at the point A that is moved from center of CS at the distance s (Fig. 2) is as follows:

$$B_2 = \frac{I\mu_0\mu_0 b}{2\pi \sqrt{s^2 + b^2} \sqrt{s^2 + 2b^2}}. \quad (7)$$

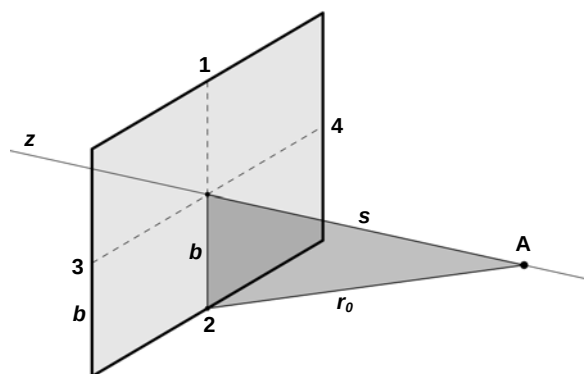


Fig. 2. Field from single wire of the coil

Considering that induction is a vector and its transversal components $\vec{B}_\perp$ are compensated (Fig. 3), the field from each wire is given by the equation:

$$B_i = \frac{\mu_0 \mu I b^2}{2\pi(s^2 + b^2)\sqrt{s^2 + 2b^2}}. \quad (8)$$

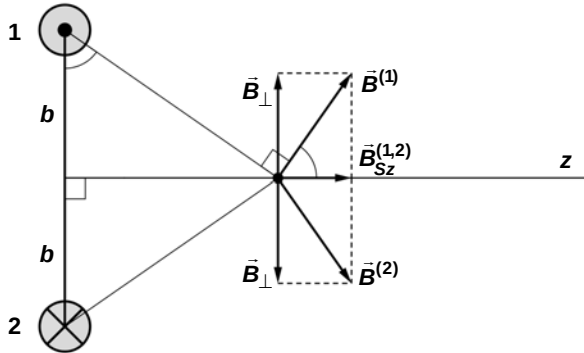


Fig. 3. Field from two wires of the coil

Field from the single coil is a superposition of the fields from all four wires:

$$B_{S1} = \frac{2I\mu_0\mu b^2}{\pi(s^2 + b^2)\sqrt{s^2 + 2b^2}}. \quad (9)$$

Described SS has several limitations:

- currents are low for heating prevention;
- small size, that is sufficient for a placing an object $10 \times 10 \times 10$ mm, in the region of homogeneity;
- distance from isocenter to the center of the coil is less than 35 mm for avoiding magnet poles effects.

The synthesis problem in analytic form is very complicated. We applied the much simpler “brute force” approach for coils parameters determination. Such parameters are: b, s, I .

Computing automation. Taking into account the large number of parameters’ variations and the needs for approximation it was decided to create the software for automated calculation of SS parameters. The software was developed using Visual Studio 2010, programming language is C#. Software has user-friendly Graphical User Interface that allows interactive monitoring of the calculations’ progress.

The algorithm has the following steps:

1. Shimming field distributions along Z-axis is calculated in 40 points located from -35 to 35 mm.
2. Data is approximated by 4÷8 degree polynomial using the ordinary least squares method.
3. Quadratic term of this polynomial is compared to the inhomogeneity term (3). If they match within tolerance, calculated parameters are added into the result area.

4. Parameters are increased by the step value. Calculation continues from the step 1 until the parameters reach their final values.

Results. For preliminary evaluation of the SS the parameters synthesis was performed in the wide range and with large step. The obtained parameters distribution is described on Fig. 4. Balls on the graph correspond to parameters that meet (4). Also this graph shows the needs increasing the current while the coil is enlarged.

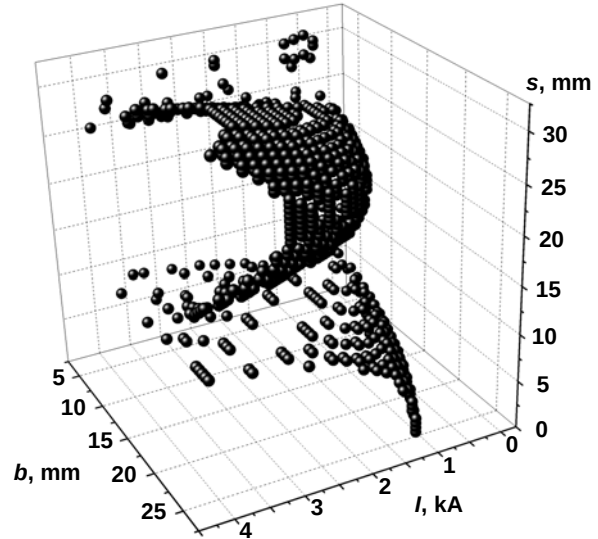


Fig. 4. Rough estimate of the parameters boundaries

The optimal SS parameters that correspond to smallest current are as follows: $I = 1076$ Ampere-turns, $b = 19.3$ mm, $s = 7.94$ mm. Polynomial that describes the SS magnetic field is as follows:

$$B_{Sz} = 52.3 + 1.1 \cdot 10^{-16} z - 0.08 z^2 - 9.4 \cdot 10^{-19} z^3 + 5.5 \cdot 10^{-5} z^4 + 9.4 \cdot 10^{-22} z^5 - 1.4 \cdot 10^{-8} z^6. \quad (10)$$

Magnetic field along Z-axis after shimming is described in Fig. 5, line 2.

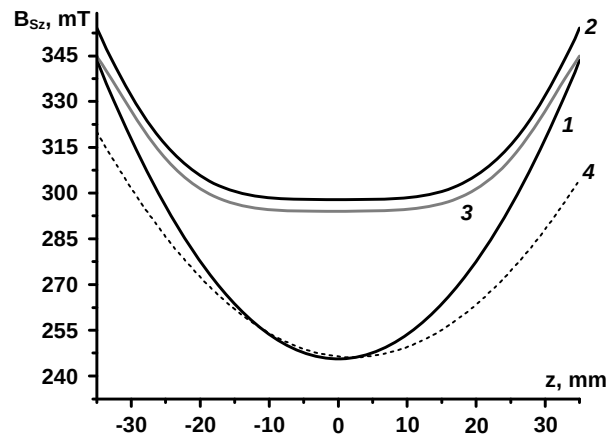


Fig. 5. Magnetic field’s distribution along the z-axis

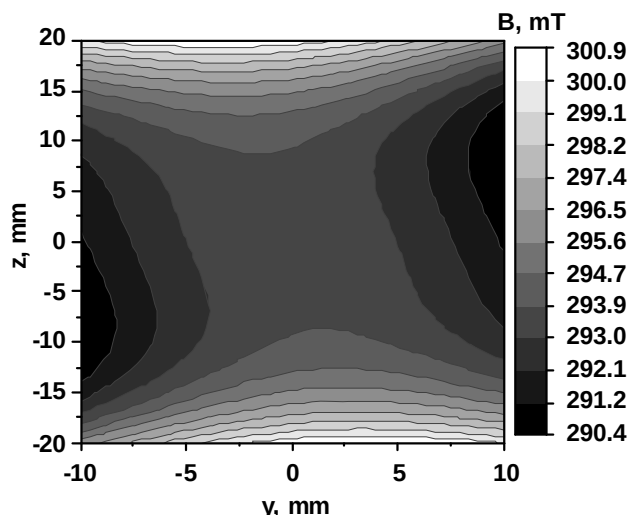


Fig. 6. Results comparison in plane yOz

Filed inhomogeneity obtained in present work (line 2) outperforms the previously obtained inhomogeneity for the same magnet (line 4) [6]. Thus inhomogeneity along Z-axis was decreased 45 times to $\Delta B \approx 0.1$ mT in area 20 mm, compared to magnet without SS (line 1).

The simulation in ANSYS Maxwell 3D 16.0 was performed to verify the obtained SS

characteristics. Simulated magnetic field distribution proves field inhomogeneity (Fig. 5, line 3 and Fig. 6). Magnetic field distribution after compensation with the proposed SS was calculated and described on Fig. 6. Field distribution is rotated around the x-axes because polynomial (2) has term $-0.01xz$. Incompatibility between line 2 and line 3 (Fig. 5) is explained by the limitations of the SS.

Conclusion. Proposed simple active shimming system compensates the quadratic term inhomogeneity of permanent magnet's field. The achieved relative inhomogeneity is 10^{-4} that is enough for magnetic resonance imaging. Designed software can serve as a tool for design, calculation and optimization of shimming, gradient and other coils of MRI scanners. Described method can be used in X and Y-directions. The practical implementation of the coils should provide the possibility to move the coils along all axes in the range of ± 5 mm and the rotation around each axes in the range of $\pm 15^\circ$. The main shortcoming of this system is relatively large currents in the coils. Future work may be related to design the shimming system that compensates the higher order terms in magnetic field spatial dependence.

Список використаних джерел

1. The Physics of Medical Imaging / Ed. by S. Webb. – Moscow: Mir, 1991. – Vol. 2. 203 p.
2. Kostyrin E. Modeling the temperature fields in the working zone of magnetic resonance imaging in order to reduce magnetic field inhomogeneity / E. Kostyrin. // Engineering Herald. – 2013. – №6. – p. 555.
3. Jezzard P. Shim coil design, limitations and implications [Електронний ресурс] / P. Jezzard. – 2006. – Режим доступу до ресурсу: <http://mri-q.com>.
4. Расчет и проектирование магнитных систем [Електронний ресурс] // СПб. – 2012. – Режим доступу до ресурсу: open.ifmo.ru/images/b/b6/144261_book.pdf.
5. Solyanik V., Sudakov O., Radchenko S. Robotic system for measuring of heterogeneity of steady magnetic field in MRI system / V. Solyanik, O. Sudakov, S. Radchenko // The XIV International young scientists' conference on applied physics. Kyiv. – 2014. – P. 148-149.
6. Maluk D. et al. Compensated coils for reduction of magnetic field inhomogeneity / D. Maluk // The XIV International young scientists' conference on applied physics. Kyiv. – 2014. – P. 144-145.

References

1. WEBB, S. (ed.) (1991) *The Physics of Medical Imaging*. 2 Ed. Moscow: Mir.
2. KOSTYRIN, E. (2013) Modeling the temperature fields in the working zone of magnetic resonance imaging in order to reduce magnetic field inhomogeneity. *Engineering Herald*, #6, p.555.
3. JEZZARD, P. (2006) *Shim coil design, limitations and implications*. [Online] p.3-6. Available from: <http://mri-q.com>. [Accessed: 15th Sep. 2017].
4. Raschjot i proektirovanie magnitnyh sistem. (2012) [Online] p.54-80. Available from: http://open.ifmo.ru/images/b/b6/144261_book.pdf [Accessed 15th Sep. 2017].
5. SOLYANIK, V., SUDAKOV, O. and RADCHENKO, S. (2014) Robotic system for measuring of heterogeneity of steady magnetic field in MRI system. In *The XIV International young scientists' conference on applied physics*, 11-14 June 2014, Kyiv, pp.148-149.
6. MALUK, D. et al. (2014) Compensated coils for reduction of magnetic field inhomogeneity. In *The XIV International young scientists' conference on applied physics*, 11-14 June 2014, Kyiv, pp.144-145.

Надійшла до редколегії 03.03.17.

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 538.9

Бардик В. Ю.¹, к.ф.-м.н., с.н.с
Тимофєєв М. В.², асп.

Контракція водних розчинів метанолу

¹Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська, 64/13,
e-mail: vital@univ.kiev.ua

²Одеський національний університет імені І.І.
Мечникова, 65026, Одеса, вул. Дворянська 2,
e-mail: yevelic@gmail.com

V. Yu. Bardic¹, PhD, Sen. Sci. Res.,
M. V. Timofeev², PhD stud.

Contraction of water-methanol solutions

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska str., 64/13,
e-mail: vital@univ.kiev.ua

²Odesa I.I.Mechnikov National University, 65082,
Odesa, Dvorjanska st., 2,
e-mail: yevelic@gmail.com

В роботі досліджується контракція (коефіцієнт стисливості) розбавленого водного розчину метанолу в наближенні віріального розкладу рівняння стану. Вона визначається усередненими, радіально симетричними, потенціалами взаємодії між молекулами води та спирту. Взаємодія між молекулами різного сорту переважає над взаємодією молекул одного сорту. Відтворена поведінка контракції водних розчинів метанолу, основні її характеристики: положення мінімуму, його глибина.

Ключові слова: контракція, вода, метанол, розчини, потенціали взаємодії

The present work is devoted to theoretical investigation of the equation of state for aqueous solutions of alcohols. The main attention is paid to compressibility coefficient (contraction) of water-methanol solution, i.e. total volume of solution is not equal to sum of volumes of its components. The equation of state of the last is investigated with help of the virial expansion up to the second virial coefficient. The thermodynamic properties of solutions, in particular contraction, is determined by averaged potentials between water and alcohol molecules. Averaging of potentials is caused by thermal rotation of molecules. Attention is focused on building averaged potentials for cross-particle interaction. The potential of cross-molecule interaction, proposed in this paper, has such a structure as the potentials between molecules of the same type. Their parameters are derived from modified Lorentz-Berthelot combining rules. Interaction between molecules of different types dominates over the interaction between molecules of the same type what leads to formation of stable solute. The behavior of the contraction of aqueous solution of methanol and its main characteristics are reproduced: position of a contraction minimum, depth of the minimum.

Key Words: contraction, water, methanol, solutions, interaction potentials

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Змішування води зі спиртом призводить до утворення розчину, об'єм V_{12} якого менший за сумарний об'єм його компонентів V_1 та V_2 . Це явище називається контракцією і характеризується параметром

$$\varphi = \frac{V_{12}}{V_1 + V_2} - 1.$$

Концентраційні та температурні залежності контракції характеризуються наступними особливостями: контракція водно-спиртових розчинів має від'ємний знак, концентраційні

криві контракції мають мінімум, глибина якого зменшується з ростом температури.

Контракція водного розчину етанолу детально розглянута в роботах [1, 2].

Дослідження контракції на прикладі контракції водного розчину етанолу вперше було виконано Д. І. Менделєєвим [3]. Він розглядає процес утворення розчинів в контексті утворення кластерів з відповідних молекул.

Властивості водних розчинів спиртів розглядаються в роботах [4 - 6]. Проте, автори обмежуються врахуванням лише структурних особливостей частинок розчину [4,5], або використанням моделювання методом Монте-Карло [6].

Очевидно, що контракція викликана неоднорідністю геометричної будови компонентів розчину та відмінністю в їх міжмолекулярній взаємодії.

Метою цієї роботи є 1) побудова усередненого потенціалу міжмолекулярної взаємодії між молекулами води та спирту та 2) аналіз температурної та концентраційної залежностей контракції водних розчинів метанолу. Певним чином ця проблема нагадує відповідну задачу для сумішей атомарних рідин. Добре відомо, що в цьому випадку контракція має позитивний знак, що відповідає тенденції до розшарування цих розчинів за атмосферного тиску. На відміну від цього, контракція водних розчинів спиртів за атмосферного тиску має негативний знак, що спричинено взаємодією між різними компонентами більш сильною порівняно зі взаємодією компонентів одного сорту. Саме ця обставина і буде об'єктом уважного дослідження у представлений роботі.

Контракція водно-спиртових сумішей в наближенні віріального рівняння стану системи

В роботах [7, 8] для опису контракції водних розчинів спиртів використовується наступний вираз:

$$\varphi(x) = -\frac{x(1-x)\Delta B}{(1-x)v_w + xv_a}, \quad (1)$$

де x - мольна частка спирту, v_w і v_a - питомі об'єми води та спирту відповідно, ΔB - комбінація других віріальних коефіцієнтів. Ця комбінація дорівнює: $\Delta B = B_w + B_a - 2B_{wa}$, де B_w та B_a - другі віріальні коефіцієнти води та спирту відповідно, B_{wa} - другий віріальний коефіцієнт, що враховує взаємодію молекул різного сорту. Додамо, що віріальні коефіцієнти розраховуються за допомогою усереднених потенціалів міжмолекулярної взаємодії. В загальному випадку, взаємодія між молекулами водно-спиртових розчинів описується достатньо складними потенціалами взаємодії. Проте, тепловий обертальний рух молекул призводить до само-усереднення потенціалів за кутовими змінними (див [9, 10, 11, 12]). Внаслідок чого термодинамічні властивості розчинів будуть визначатися усередненими потенціалами.

Можливість використання віріальних розкладів при обчисленні контракції водно-спиртових розчинів пояснюється наступними

причинами. Віріальні розклади явно можна використовувати для побудови асимптотичних розкладів контракції при малих концентраціях спирту ($x \rightarrow 0$), а також – при малих концентраціях води. У наближенні других віріальних коефіцієнтів ці розклади можна будувати до x^2 та $(1-x)^2$ відповідно. Ці асимптотичні криві при подальшому їх продовженні перетинаються в точці, яка майже точно співпадає з положенням мінімуму контракції реальних водно-спиртових розчинів. Ця обставина дає нам право вважати, що віріальний розклад рівняння стану розчину дозволяє відтворити найбільш суттєві особливості поведінки контракції. Додамо також, що використання більш загального рівняння Ван-дер-Ваальса не додає майже нічого до картини, що відповідає рівнянню (1).

Усереднені потенціали взаємодії між молекулами води та спирту будемо описувати за допомогою найпростішого потенціалу – потенціалу Сазерленда:

$$U(r) = \begin{cases} -\varepsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6, & \sigma \leq r \\ \infty, & r < \sigma \end{cases}$$

Тут σ - розмір частинки, ε - енергія взаємодії, r - відстань між центрами мас частинок. Внесок сил притягання в усереднений потенціал головним чином зумовлений диполь-дипольною взаємодією. Її усереднений внесок пропорційний $\sim 1/r^6$ [12, 13].

Використання усередненого потенціалу $U(r)$ дозволяє розрахувати другий віріальний коефіцієнт стандартним чином [14]:

$$B = 2\pi \int (1 - \exp(-\beta U(r))) r^2 dr$$

Для спрощення подальшого аналізу, тут ми розглянемо тільки випадок $\frac{\varepsilon}{k_B T} < 1$. Зазначимо,

що основні закономірності в поведінці рівняння стану розчину загалом зберігаються. Другий віріальний коефіцієнт у цьому випадку набуває вигляду:

$$B = \frac{2\pi\sigma^3}{3} \left(1 - \frac{\varepsilon}{k_B T} \right). \quad (2)$$

Комбінацію ΔB представимо у вигляді

$$\Delta B = \Delta \beta - \frac{\Delta \alpha}{k_B T}, \quad (3)$$

де

$$\Delta \beta = \frac{2\pi}{3} (\sigma_1^3 + \sigma_2^3 - 2\sigma_{12}^3), \quad (4)$$

є комбінацією, що породжується відштовхувальною частиною потенціалу взаємодії, а

$$\Delta \alpha = \frac{2\pi}{3} (\sigma_1^3 \varepsilon_1 + \sigma_2^3 \varepsilon_2 - 2\sigma_{12}^3 \varepsilon_{12}) \quad (5)$$

визначається його притягальною частиною.

Зазначимо, що для правильного відтворення характеру температурної залежності мінімуму контракції – зменшення глибини мінімуму з температурою – необхідно, щоб виконувалась нерівність $\Delta \alpha < 0$.

Мінімум контракції визначається співвідношенням

$$\varphi_{\min}(T) = -\frac{1}{(\sqrt{v_w} + \sqrt{v_a})^2} \left(\Delta \beta - \frac{\Delta \alpha}{k_B T} \right), \quad (6)$$

а її температурна похідна

$$\frac{d\varphi_{\min}}{dT} = -\frac{1}{(\sqrt{v_w} + \sqrt{v_a})^2} \frac{\Delta \alpha}{k_B T^2}.$$

Аналіз потенціалів взаємодії

Величини $\Delta \alpha$ і $\Delta \beta$ визначаються співвідношенням між параметрами потенціалів міжмолекулярної взаємодії. Тут головною проблемою є правильне відтворення величин ε_{12} та σ_{12} для перехресної взаємодії між молекулами.

Зазначимо, що в літературі для відтворення ε_{12} та σ_{12} використовується правило Лоренца-

Бертло: $\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}$, $\sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}$. Воно є

наслідком простих геометричних міркувань для розміру частинок, а також простої залежності константи дисперсійної взаємодії від поляризованості: $\varepsilon_{12} \sim \alpha_1 \alpha_2$ - для різних та $\varepsilon \sim \alpha^2$ - для однакових частинок. Знак $\Delta \alpha$ залежить від співвідношень між діаметрами частинок та константами взаємодії (див. рис. 1). В області $\Delta \alpha < 0$ на Рис. 1, $\Delta \alpha$ близька до нуля в області значень параметрів, що відповідають

системі вода-метанол і вода-етанол. Для реальних розчинів вона має бути суттєво більшою ($|\Delta \alpha| = 3-10$), але цього можна досягти збільшенням енергії перехресної взаємодії ε_{12} у порівнянні з $\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}$, а також σ_{12} у порівнянні з $\sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}$.

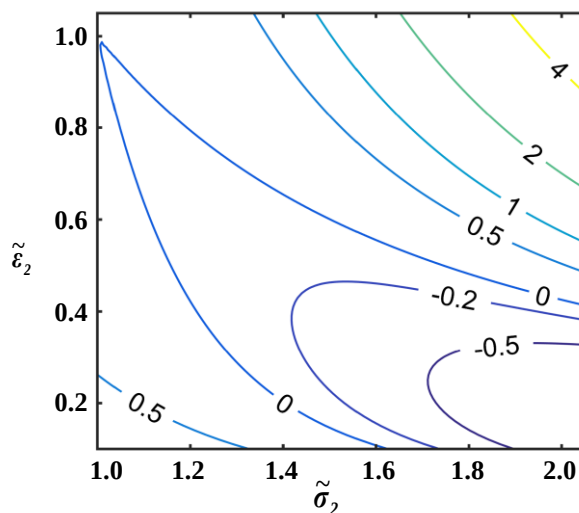


Рис. 1. Значення $\Delta \alpha$. $\tilde{\sigma}_2 = \sigma_2 / \sigma_1$, $\tilde{\varepsilon}_2 = \varepsilon_2 / \varepsilon_1$.

Модифікація потенціалу усередненої взаємодії між молекулами води і спирту

Молекули води і спиртів є полярними і взаємодія між ними визначається, головним чином, електростатичними силами, енергія взаємодії яких залежить від взаємної орієнтації молекул. Тому вже не можна стверджувати, що для усередненого потенціалу $\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}$. Ми модифікуємо співвідношення Лоренца-Бертло у найпростіший спосіб, вводячи коректуючі коефіцієнти λ_σ та λ_ε :

$$\varepsilon_{12} = \lambda_\varepsilon \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2},$$

$$\sigma_{12} = \lambda_\sigma \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}.$$

Їх значення ми знайдемо з вимоги оптимального відтворення температурної залежності мінімуму контракції. Зазначимо, що для відсутності розшарування водних розчинів спиртів потрібно, щоб $\varepsilon_{12} > \varepsilon_1, \varepsilon_2$.

Значення ε_1, σ_1 та ε_2, σ_2 беруться з робіт [12], присвячених дослідженню властивостей однокомпонентних рідин. При цьому, значення

діаметрів молекул визначаються з умови: $U(r_{12} = \sigma) = 0$, де U є усередненим потенціалом взаємодії між молекулами одного сорту, а ε визначається їх глибиною. Відповідні значення представлено в таблиці 1.

В наших розрахунках ми враховуємо, що в щільному середовищі електростатична взаємодія послаблюється внаслідок ефектів екранування:

$$\Phi_E \rightarrow \frac{1}{\zeta} \Phi_E,$$

де ζ є високочастотною складовою діелектричної проникності. Вона пов'язана з густиною речовини співвідношенням

$$\frac{\zeta(\rho) - 1}{\zeta(\rho) + 2} = \frac{4\pi}{3} \frac{\rho}{m} \alpha,$$

де α - електронна поляризованість, m - маса молекули, ρ - густина речовини.

Для води і метанолу отримаємо значення, близькі до $\zeta = 1.8$. Це значення задовільно узгоджується з коефіцієнтом заломлення світла у цих речовинах: $\zeta \approx n^2$.

Таблиця 1

Значення σ та ε потенціалів для водного розчину метанолу. T_{tr} - температура потрійної точки води.

	$\sigma, \text{\AA}$	$\varepsilon, k_B T_{tr}$
Вода	2.85	2.34
Метанол	3.3	2.2
Вода-метанол	3.05	2.36

Значення λ_σ та λ_ε , що найкращим чином відтворюють поведінку мінімуму контракції розчину вода-метанол, становлять:

$$\lambda_\varepsilon = 1.041, \lambda_\sigma = 0.9923$$

Відповідні значення σ_{12} і ε_{12} перехресної взаємодії розміщено в Таблиці 1. Енергія перехресної взаємодії ε_{12} , як і очікувалось, перевищує значення ε_1 та ε_2 . Отримане значення σ_{12} трохи менше за середній діаметр молекул розчину. Це можна пояснити тим фактом, що молекули мають несферичну форму, а в поведінці контракції переважають такі їх взаємні орієнтації, які зменшують відстань між ними.

Отримане значення σ_{12} (див табл.1) майже співпадає з сумою радіусу молекули води та найменшої з осей еліпсоїду, який охоплює молекулу метанолу. Воно є помітно меншим від значення, отриманого в [8]: $\sigma_{12} = 3.61 \text{\AA}$.

Основні результати та висновки

Виконана робота присвячена дослідженню контракції водно-спиртових розчинів, яка є однією з найпростіших термодинамічних властивостей розчинів. Її характеристики визначаються усередненими потенціалами міжмолекулярної взаємодії. Усереднення потенціалів зумовлене тепловим обертанням молекул. Параметри усереднених потенціалів для води та метанолу досліджені в роботах [8, 12]. Саме тому в представленій роботі особливе значення надається детальному дослідженню потенціалу перехресної взаємодії молекул розчину.

Усереднений потенціал перехресної взаємодії моделюється за допомогою радіально симетричного потенціалу, який має таку саму структуру, як усереднені потенціали в чистих речовинах. Параметри цього потенціалу визначено за допомогою модифікованого правила Лоренца-Бертло. Введені нами константи перенормування енергії і діаметру перехресної взаємодії дозволяють повністю відтворити температурну поведінку мінімуму контракції водних розчинів метанолу.

На рис.2 представлені розраховані за формулою (1) значення контракції водного розчину метанолу.

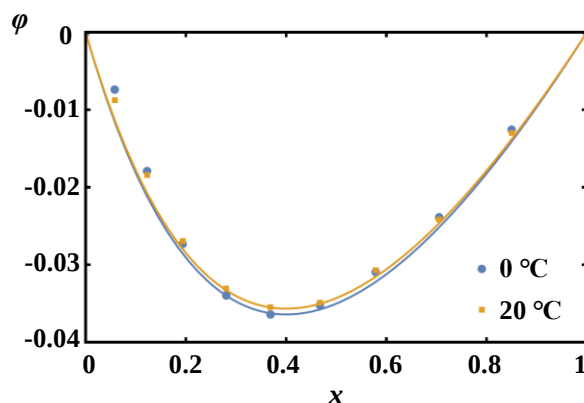


Рис. 2. Контракція розчину вода-метанол при $T = 273\text{K}, 293\text{K}$. Лінії – розрахунок. Точки – експериментальні дані [15,16].

Для цього використано параметри потенціалів взаємодії з Табл. 1, а також формули (3) - (5). Як і має бути, контракція водного розчину метанолу має від'ємний знак – розчин стискається порівняно з об'ємом своїх компонентів. З ростом температури глибина мінімуму зменшується.

Порівняння показує, що основні характеристики контракції, розраховані за допомогою рівняння (1), задовільно узгоджуються з тими, що вимірюються експериментально (див. табл. 2).

Таблиця 2

Характеристики контракції при $T = 283\text{K}$. $x_{\min}$ – концентрація метанолу та величина контракції $\varphi_{\min}$ в точці її мінімуму.

	експ. дані [15, 16]	розрахунок
$x_{\min}$	0.4	0.4
$\varphi_{\min}$	-0.036	-0.036

Список використаних джерел

1. Gotsul'skii V. Ya. Features of the Temperature and Concentration Dependences of the Contraction of Aqueous Solutions of Ethanol / V. Ya. Gotsul'skii, N. P. Malomuzh, V. E. Chechko // Russian Journal of Physical Chemistry A. - 2013. - V. 87, No. 10. - P 1638-1644.
2. Gotsul'skiy V. Ya. Particular Points of Water-Alcohol Solutions / V. Ya. Gotsul'skiy, N. P. Malomuzh, V. E. Chechko // Russian Journal of Physical Chemistry A. - 2015. - V. 89, No. 2. - P. 207-213.
3. Менделеев Д. И. Растворы. Серия "Классики науки" / Д. И. Менделеев. – М.: Изд-во Академии наук СССР, 1956. – 1170 с.
4. Balankina E. S. The Influence of the Size and Packing of Molecules on the Volume-Thermal Properties of Solutions / E. S. Balankina // Russian Journal of Physical Chemistry. – 2008. – V. 82, № 7. – P. 1104-1109.
5. Баланкина Е. С. Теоретическое исследование взаимосвязи «плотность упаковки – термодинамические свойства» конденсированных систем: автореф. дис. на соискание учен. степени докт. физ.-мат. наук: спец. 02.00.04 "Физическая химия" / Е. С. Баланкина. – Тверь, 2010. – 34 с.
6. Huš M. Properties of Methanol-Water Mixtures in a Coarse-Grained Model / M. Huš, G. Žakelj, T.

Інші термодинамічні властивості розчинів вода-метанол ми плануємо обговорити в окремих роботах.

Ми висловлюємо глибоку подяку академіку НАНУ Л. А. Булавіну та учасникам семінару кафедри молекулярної фізики КНУ за обговорення результатів роботи.

Ми щиро вдячні професору Л. Петерсону та професору В. Є. Погорєлову за обговорення та поради.

Ми особливо вдячні професору ОНУ М. П. Маломужу за допомогу в формулюванні задачі та обговорення отриманих результатів.

References

1. GOTSUL'SKII, V.YA., MALOMUZH, N.P., CHECHKO, V.E. (2013) Features of the Temperature and Concentration Dependences of the Contraction of Aqueous Solutions of Ethanol, *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 87 (10), p. 1638-1644.
2. GOTSULSKIY, V.YA., MALOMUZH, N.P., CHECHKO, V.E. (2015) Particular Points of Water-Alcohol Solutions, *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 89 (2), p. 207-213.
3. MENDELEEV, D. I. (1956) *Solutions, Ser. Science Classics*. Moscow: Akad. Nauk SSSR.
4. BALANKINA, E.S. (2008). The Influence of the Size and Packing of Molecules on the Volume-Thermal Properties of Solutions, *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 82 (7), p. 1104-1109.
5. BALANKINA, E.S. (2010) *Theoretical investigation of relationship "Packing coefficient – thermodynamic properties" of condensed systems* (Doctoral dissertation). Tver gos. univ., Tver.
6. HUŠ, M., ŽAKELJ, G. and URBIČ, T. (2015) Properties of Methanol-Water Mixtures in a Coarse-Grained Model, *Acta Chimica Slovenica*. 62 (3), p. 524-530.
7. TIMOFEEV, M.V. (2014) Model of contraction of water-alcohol solutions, *Zhurnal Fizicheskoi Khimii*. 88 (9), p. 1354-1358.

- Urbič // *Acta Chimica Slovenica*. – 2015. – Т. 62. – №. 3. – С. 524-530.
7. Тимофеев М. В. Модель сжатия водно-спиртовых растворов / М. В. Тимофеев // *Журн. физ. Химии*, – 2014. – Т. 88, № 9. – С. 1354-1358.
8. Gotsul'skii V. Ya. Contraction of aqueous solutions of monoatomic alcohols / V. Ya. Gotsul'skii, N. P. Malomuzh, M. V. Timofeev, V. E. Chechko // *Russian Journal of Physical Chemistry*, A. – 2015. - V.89, No. 1.- P. 51-56.
9. Fisenko A. I. To what extent are thermodynamic properties of water argon-like? / A. I. Fisenko, N. P. Malomuzh, A. V. Oleynik // *Chemical Physics Letters*. - 2008. - V. 450. – No. 4–6. - P. 297-301.
10. Lishchuk S. V. Why thermodynamic properties of normal and heavy water are similar to those of argon-like liquids? / S.V. Lishchuk, N.P. Malomuzh, P.V. Makhlaichuk // *Physics Letters A*. – 2010. – V. 374. – No. 19–20. – P. 2084–2088.
11. Makhlaichuk P. V. Nature of the kinematic shear viscosity of low-molecular liquids with averaged potential of Lennard-Jones type / P. V. Makhlaichuk, V. N. Makhlaichuk, N. P. Malomuzh // *Journal of Molecular Liquids*. - 2017. - V. 225. - P. 577-584.
12. Timofeev M. V. Simulation of the interaction potential between water molecules / M. V. Timofeev // *Ukr. J. Phys.* – 2016. – V. 61. – No. 10. – P. 893-900.
13. Махлайчук П. В. Роль сетки водородных связей в формировании свойств воды: дис. канд. физ.-мат. наук : спец. 01.04.02 "Теоретична фізика"/ П. В. Махлайчук. – Одесса, 2013. – 152 с.
14. Ландау Л. Д. Статистическая физика, ч.1 / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. - М.: Наука, 1976. - 584 с.
15. Lange's Handbook of Chemistry, 10th ed. / [Ed. N.A. Lange]. – N.Y.: McGraw-Hill, 1967. – 2001 p.
16. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 44th ed. / [Ed. C.D. Hodgman]. – Cleveland: The Chemical Rubber Publishing Co., 1963. – 3604 p.
8. GOTSUL'SKII, V.YA., MALOMUZH, N.P., TIMOFEEV, M.V., CHECHKO, V.E. (2015) Contraction of aqueous solutions of monoatomic alcohols, *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 89 (1), p. 51-56.
9. FISENKO, A. I., MALOMUZH, N.P., OLEJNIK, A.V. (2008) To what extent are thermodynamic properties of water argon-like?, *Chemical Physics Letters*. 450.(4–6), p. 297-301.
10. LISHCHUK, S. V., MALOMUZH, N.P., MAKHLAICHUK, P.V. (2010) Why thermodynamic properties of normal and heavy water are similar to those of argon-like liquids?, *Physics Letters A*. 374 (19–20), p. 2084–2088.
11. MAKHLAICHUK, P.V., MAKHLAICHUK, V.N., MALOMUZH, N.P. (2017) Nature of the kinematic shear viscosity of low-molecular liquids with averaged potential of Lennard-Jones type, *Journal of Molecular Liquids*. 225, p. 577-584.
12. TIMOFEEV, M.V. (2016) Simulation of the interaction potential between water molecules, *Ukrainian Journal of Physics*. 61 (10), p. 893-900.
13. MAKHLAICHUK, P.V. (2013) *Role of the hydrogen bonds in the formation of water properties*, Thesis (Candidate degree), I. I. Mechnikov Odessa National Univ., Odesa.
14. LANDAU, L.D., LIFSHITS, E.M. (1976) *Theoretical Physics. Statistical Physics. Part 1*. Moscow: Nauka.
15. LANGE, N.A., DEAN, J.A. (1967) *Lange's Handbook of Chemistry*. 10th Ed. New York: McGraw-Hill.
16. HODGMAN, C.D. (1963) *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 44th Ed. Cleveland: The Chemical Rubber Co.

Надійшла до редколегії 15.03.2017

УДК 538.915

Горкавенко Т. В.¹, к.ф.-м.н., м.н.с.,
Плющай І. В.², к.ф.-м.н., доц.,
Плющай О.І.³, к.ф.-м.н., с.н.с.,
Макара В. А.⁴, д.ф.-м.н., проф.

T. V. Gorkavenko¹, PhD.,
I. V. Plyushchay², PhD.,
O. I. Plyushchay³, PhD.,
V. A. Makara⁴, Dr. Sci., Prof.

Ab initio розрахунок взаємодії домішки азоту з крайовою дислокацією в кремнії

Ab initio calculation of interaction between nitrogen impurity and edge dislocation in silicon

^{1,2,4}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
³Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова
НАН України, 03142, м. Київ, бульв.
Академіка Вернадського 36,
e-mail: ¹tvgoraka@gmail.com

^{1,2,4}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
³G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the
N.A.S. of Ukraine, 03142, Kyiv, Academician
Vernadsky Boulevard, 36
e-mail: ¹tvgoraka@gmail.com

Проведено ab initio розрахунок взаємодії крайової дислокації з домішковими атомами азоту в надкомірці з 180 атомів кремнію. Розрахунок проведено методом функціоналу густини в узагальненому градієнтному наближенні. Отримано криву взаємодії домішкових атомів азоту з крайовою дислокацією в кремнії. Встановлено рівноважне положення домішкових атомів поблизу ядра дислокації, обчислені енергії зв'язку домішкових атомів азоту з крайовою дислокацією. Представлені та проаналізовані електронні спектри обраної надкомірки при різних положеннях домішок. Результати розрахунків проаналізовано з точки зору можливості виникнення зонного магнетизму.

Ключові слова: кремній, електронна структура, крайова дислокація, домішка азоту, магнітне впорядкування.

Ab initio calculations of interaction of the edge dislocation with nitrogen impurity atoms in supercell composed of 180 Si atoms are presented. The density functional theory in the general gradient approximation has been used for numerical calculation. The interaction curve of nitrogen impurities with the edge dislocation in silicon was obtained. The equilibrium positions of impurity atoms in the vicinity of the edge dislocation cores are calculated. The binding energy of nitrogen impurity atoms with edge dislocation is 5.05 eV per nitrogen atom, indicating the possibility of formation of impurity atmospheres around dislocations cores. The electronic spectra of supercell (composed of 180 Si atoms) with dipole of two edge dislocations with nitrogen impurities in different positions are presented and analyzed. In general, the obtained spectra correspond to the spectra of pure Si, the main difference is formation narrow impurity peak nearly Fermi level in the case, when nitrogen atom is in the vicinity of the edge dislocation cores. Results of calculations are analyzed in terms of the possible formation of the band magnetism.

Key Words: silicon, electronic structure, edge dislocation, nitrogen impurity, magnetic ordering.

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

Відомо, що електрофізичні властивості кремнію сильно залежать від наявності та взаємодії дефектів, що й досі є об'єктом інтенсивного дослідження. Наприклад, в роботі [1] було показано, що легування азотом кремнію призводить до сильного зміцнення вихідних кристалів. Нам відомо лише кілька робіт по розрахунку енергії взаємодії точкових дефектів з дислокаціями в кремнії, наприклад, [2]. Також з'являються нові експериментальні дані про вплив магнітного поля на домішкову-

дислокаційну взаємодію в кремнії, але поки що не існує послідовної теорії, яка б пояснювала вплив магнітного поля на дефектну структуру діамантних напівпровідників [3].

Отже, метою роботи є дослідження електронної структури кремнію з домішковим азотом в ядрі крайової дислокації та аналіз можливості формування магнітних моментів на обірваних зв'язках.

Результати розрахунку та їх обговорення

Проведено *ab initio* розрахунки повної енергії та електронних спектрів надкомірки зі 180 атомів

Si, що містить диполь з двох крайових дислокацій та два атоми азоту в області ядра дислокації, при різних положеннях азоту. Розрахунки проводились методом функціоналу густини в узагальненому градієнтному наближенні за допомогою пакета програм ABINIT.

На рис. 1 показано криву залежності повної енергії від положення атомів азоту, яка по вигляду відповідає потенціалу парної взаємодії Ленарда-Джонса, що свідчить про адекватність наших розрахунків. Рівноважне положення домішкових атомів азоту на $\sim 0,5\%$ ближче до ядра дислокації у порівнянні з положенням атома кисню поблизу ядра дислокації [3]. Енергія зв'язку атомів азоту з крайовою дислокацією становить 5,05 еВ на один атом азоту.

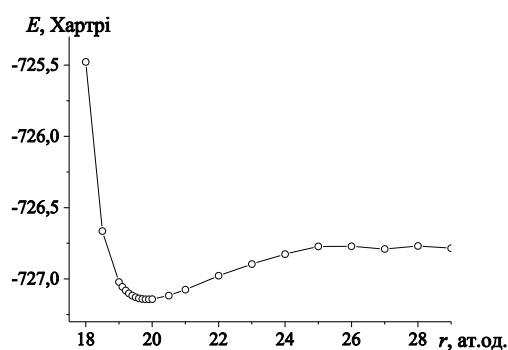


Рис. 1. Залежність повної енергії надкомірки Si від положення домішок.

Приклади електронних спектрів надкомірки з різним положенням домішкового азоту показано на рис. 2. У випадку положення азоту, коли повна енергія надкомірки виходить на поличку, в забороненій зоні з'являється гострий пік під зоною провідності. Рівень Фермі попадає майже на максимум цього піка. У випадку рівноважного

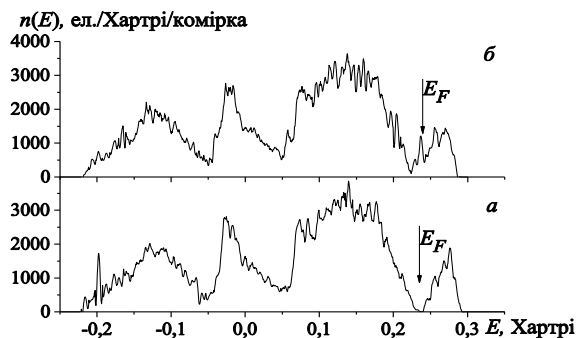


Рис. 2. Густина електронних станів надкомірки Si: а – рівноважне положення N, б – повна енергія надкомірки виходить на поличку.

положення азоту домішковий пік зникає внаслідок пасивації обірваних зв'язків.

За критерієм Стонера, для виникнення магнітного впорядкування необхідна наявність напівзаповненої вузької підзони в околі рівня Фермі [3]. Якраз таким є домішковий пік (див. рис. 2 б) у випадку, коли повна енергія надкомірки виходить на поличку. Отже, в даному випадку може відбуватись формування магнітних моментів на обірваних зв'язках.

Висновки

Встановлено рівноважне положення атомів азоту поблизу дислокацій в кремнії. Значення енергії зв'язку атомів азоту з крайовою дислокацією свідчить про можливість утворення домішкових атмосфер навколо ядра дислокації. Розрахунки проаналізовано з точки зору можливості виникнення зонного магнетизму.

Список використаних джерел

1. Sumino K., Imai M. Interaction of dislocations with impurities in silicon crystals studied by in situ X-ray topography / K. Sumino, M. Imai // Philosophical Magazine A. – 1983. – V. 47, No 5, P. 753 – 766.
2. Masuda-Jindo K, Kojima K., Kawado S. Atomistic simulation study on dislocation locking by impurity clusters in Si crystal / K. Masuda-Jindo, K. Kojima, S. Kawado. – North-Holland: Elsevier Science Publishers, 1990. – 1369 P.
3. Plyushchay I.V., Plyushchay O.I., Makara V.A. Ab initio calculation of magnetic interaction between edge dislocation and oxygen impurity in silicon / I.V. Plyushchay, O.I. Plyushchay, V.A. Makara // Metallofizika i Noveishie Tekhnologii. – 2014. – V. 36, No 5, P. 589–596.

References

1. SUMINO, K., IMAI, M. (1983) Interaction of dislocations with impurities in silicon crystals studied by in situ X-ray topography. Philosophical Magazine A. 47 (5), p. 753-766.
2. MASUDA-JINDO, K., KOJIMA, K., KAWADO, S. (1990) Atomistic simulation study on dislocation locking by impurity clusters in Si crystal. North-Holland: Elsevier Science Publishers.
3. PLYUSHCHAY, I. V., PLYUSHCHAY, O. I. and MAKARA, V. A. (2014) Ab initio calculation of magnetic interaction between edge dislocation and oxygen impurity in silicon. *Physics of Metals and Advanced Technologies*. 36 (5).p. 589-596.

Надійшла до редколегії 20.02.17

УДК 628.9.038.

Гриценко К. П.¹, к.ф.-м.н., с.н.с.,
Ящук В. М.², д.ф.-м.н., проф.,
Навозенко О.М.², інж.,
Шрадер С.³, д.ф.-м.н., проф.

Застосування нанесених у вакуумі перфторполімерних плівок в органічних світлодіодах, органічних польових транзисторах і фотовольтаїчних пристроях

¹Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.
Лашкарьова НАН України, 03650, Київ,
проспект Науки 41

^{2,3}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13

⁴Університет прикладних наук Вільдау,
Hochschulring 1, 15745, Німеччина
e-mail: ³a.navozenko@ukr.net

K. P. Grytsenko¹, PhD., Sen. Sci. Res.,
V. M. Yashchuk², Dr Sci, Prof.,
O. M. Navozenko², Eng.,
S. Schrader³, Dr Sci, Prof.

Applications of vacuum-deposited perfluoropolymer films in organic light- emitting diodes, organic field-effect transistors and photovoltaic devices

¹V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics
NAS of Ukraine, 41 Nauki pr., Kyiv, 03650, Ukraine

^{2,3}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13

⁴University of Applied Sciences Wildau,
Hochschulring 1, 15745, Germany

e-mail: ³a.navozenko@ukr.net

Стаття присвячена застосуванню перфторованих тонких полімерних плівок, отриманих за допомогою вакуумного нанесення, в різних органічних електронних пристроях, наприклад, в органічних світлодіодах, органічних польових транзисторах, електретах та фотовольтаїчних елементах. Мета статті - пояснити особливості функціонування ряду органічних електронних систем, що містять в своєму складі тефлонові шари. Проводиться порівняння дії цих пристроїв з аналогічними без тефлонового шару.

Ключові слова: ПТФЕ, ОСД, ОПТ, фотовольтаїка, тонкі плівки.

Polytetrafluoroethylene (PTFE) is one of a type of polymers that possesses many unique mechanical, optical and electrical properties therefore it is widely used in electronics. This paper is devoted to possible applications of perfluorinated thin films in different electronic devices such as organic light-emitting diodes (OLEDs), organic field-effect transistors (OFETs), sensors, electrets and photovoltaic devices (PV). Advantageously, the paper considers PTFE films obtained by vacuum deposition. The aim of the paper is to present short review describing the peculiarities of these electronic devices with teflon layer. Article also contains the comparison of the different electronic devices fabricated with and without perfluorinated thin films. PTFE films can be used as a protective coating for electrical devices, buffer layer in OLED and PV, the second gate layer in OFET. Using a PTFE layer in the devices gives the possibility to enhance their optoelectronics properties and working time as well.

Key Words: PTFE, OLED, OFET, PV, thin films.

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Introduction

Polytetrafluoroethylene (PTFE) is one of a class of polymers that has many unique properties as low friction coefficient, high heat resistance, ability to be used under cryogenic temperature, resistance to aggressive environments and durability, which make it valuable in scores of applications. In general, the PTFE drawing process can give rise to preferred orientation of the molecular chain axis. This gives possibility to create a PTFE material with oriented

dipole moments [1, 2]. PTFE is one of most thermal stable polymers. PTFE mechanical properties, for example, flexible and elastic are the same in large temperature range, from -269 till 260 C. PTFE resistant to prolonged exposure to ultraviolet radiation at moderate doses of radiation. Also PTFE has unique chemical resistance to the most known aggressive environments. Such amazing resistance and stability can be explained by the high strength of the C-F bond which is the strongest bond among all

known carbon bonds in inorganic chemistry. High spatial size of the fluorine atom and spiral position of the fluorine atoms around carbon chain make impossible the destruction of the C-C bonds by the chemical reagents. PTFE surface energy has the lowest value among all known solid materials. Wettability of PTFE by water and organic liquids is very low. The low adhesion of PTFE to any materials, including adhesives, is well known, and therefore PTFE is widely used in engineering. Weak adhesion forces are explained by the small surface energy and poor wettability of PTFE. Among all known solid insulating materials, PTFE has the lowest dielectric constant and the tangent of the dielectric loss angle [3, 4]. These advantages make it possible to use it as protective coatings of organic nanocomposites defending them from external influences. However, it is known that Teflon is breathable [2].

Different perfluoropolymer (PFP) and partially fluorinated fluoropolymer (FP) films were deposited using various methods: thermal decomposition of bulk PTFE in vacuum, magnetron, ion and laser sputtering of bulk PTFE target, plasma polymerisation and hot wire initiated chemical vapor deposition, using fluoromonomers and fluorogasses. Scientific researches work on design new materials based on thin perfluoropolymer film created by deposition from gas phase of chemically active small molecules. PTFE films obtained by vacuum deposition are transparent in the visible, ultraviolet and near infrared regions and have low surface energy. These properties are important for production of modern materials for optical devices. Radially these materials can be used into industrial technologies [5, 6, 7, 8, 9].

Together with earlier used polytetrafluoroethylene (PTFE), the novel polymers like Teflon AF and other with a more complex chemical structure were used in organic light-emitting diodes (OLED), organic field-effect transistors (OFET), sensors and photovoltaic devices (PV) [10]. We include these valuable examples in

the review due to the same films can be made from the gas phase.

The aim of the paper is to present short review concerned applications of perfluorinated thin polymer films in OLED, OFET and PV devices.

OLED

Several studies have shown that improvements of OLED performance can be achieved by inserting a buffer layer between the ITO anode and hole transporting layer [11]. One of classes of the substances which are suitable for this goal is the fluorocarbon (CF_x), for which PTFE belongs to.

In these works [12, 13, 14] hole-only devices with the Teflon buffer layer were fabricated. Thin buffer layer in OLED was deposited in vacuum by thermal heating of the bulk PTFE. The thickness of the buffer layer was varied from 2 to 20 nm. The optimal thickness of 2 nm was found out for the device structure of ITO/buffer layer/Alq₃/Al. Compared with the devices without buffer layer, the OLED with PTFE buffer layer it was shown, that the external quantum efficiency of devices was improved.

The explanation of this effect lies in the fact that fluorine atoms align on top of the ITO surface creating the dipole moments directed inward the ITO. Such dipole moments reduce the energy barrier between the ITO and adjacent organic interface, reduce electron escape and thus increases the work function of the anode. Figure 1 shows a diagram of the energy levels of the structure of ITO-CF_x-NPB (a-naphthylphenylbiphenyl diamine). The dipoles due to the CF_x buffer layers can effectively reduce the injection barrier from the Fermi level of the ITO to the HOMO level of NPB [15].

Another attempt to use PTFE in OLED structure was done by authors in reference [16] where (ITO)/Polytetrafluoroethylene (PTFE)/tris(8-hydroxyquinoline) aluminum (Alq₃)/Al OLEDs were constructed (Fig. 2). When an insulating layer with an optimized thickness was inserted between the organic layer and the metal electrode, an increase

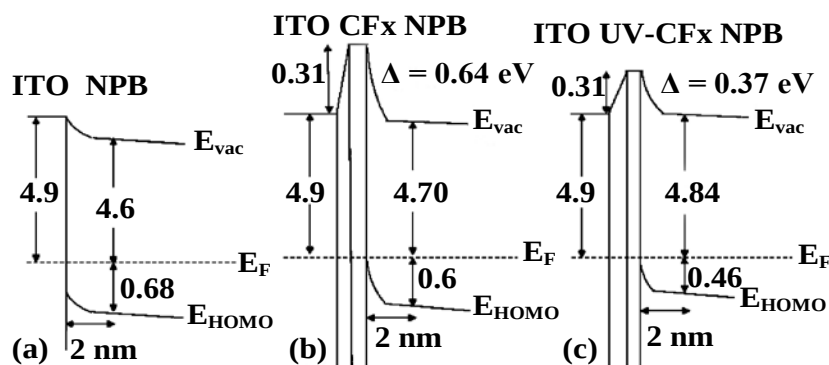


Fig. 1. Energy level diagram showing the interfaces of: (a) ITO/NPB, (b) ITO/CF_x/NPB and (c) ITO/UV-CFx/NPB. E_{vac} , E_F and E_{HOMO} correspond to vacuum level, Fermi level and HOMO level, respectively.

in charge injection was caused by a lowering of the charge injection barrier due to a voltage drop across the insulating layer.

It should be mentioned, that the best results were obtained when the thinnest PFP buffer layer was used. It is known, that films were not smooth and continuous (Fig. 3). So the more correctly the system should be considered as OLED with PFP nanoclusters on the interface.

The surface morphologies of the PTFE films are thickness dependent. A lamellar structure is shown to

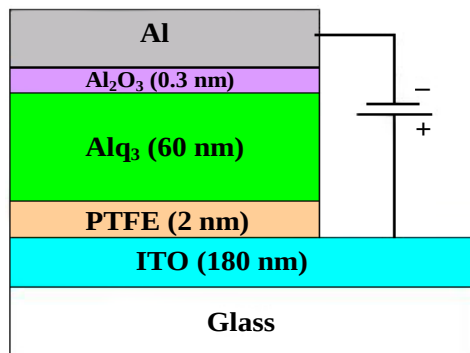


Fig. 2. Scheme of OLED.

develop starting from a thickness of 2 nm and the diameter of the lamellar is thicker when the film is thicker. A uniformly smooth surface was observed in the PTFE film with a thickness of 1 nm and a worm-like lamellar structure was not observed. For the

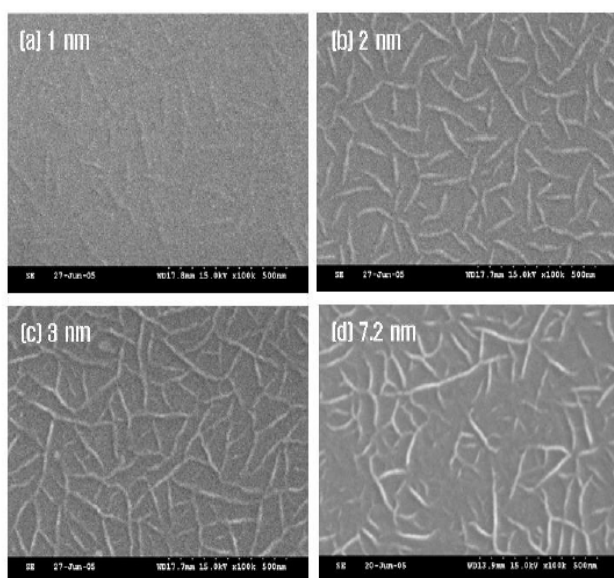


Fig. 3. Surface morphologies of PTFE films with thicknesses of 1, 2, 3 and 7.2 nm.

PTFE film with a thickness of 2 nm, a worm-like lamellar structure was observed on the smooth surface and the length of lamellar was 100 - 200 nm. When the thickness of the PTFE film was more than 2 nm, the lamellar structure was more developed by linking to each other. Therefore, the surface

roughness was increased. When the thickness of the PTFE was more than 2 nm, the decrease in the current density could also be explained by the increasing interfacial roughness at the ITO/PTFE/ Alq_3 interface.

Thin films used in OLEDs, for example, PEDOT:PSS may have large microstructural and electrical inhomogeneities, with morphology and conductivity varying by orders of magnitude over different film regions. These effects doubtless lead to inhomogeneous charge extraction with enhanced conductivity in some locations and “dead spots” in others. Therefore, there is a need for an anode interfacial layer that has greater charge-blocking characteristics, has strong adhesion to the anode surface. This can give an increase of hole injection, improve carrier balance and device efficiency. In the hole-only devices hole injection was improved by the insertion of the Teflon buffer layer. The effect of the self-assembled monolayer was interpreted in to enhance hole injection via reduced charge backscattering [17, 18, 19].

A method for improving the efficiency of charge carrier injection at both cathode and anode of inverted top-emitting organic light-emitting diode (TOLED) was proposed [20]. A bottom-emitting OLED (BOLED) is first fabricated on a flexible substrate, which is then transferred as a whole to a glass substrate for the fabrication of the inverted TOLED (ITOLED). The electrode engineering that is responsible for the improvement, which is not possible in the traditional fabrication of ITOLED, is made realizable by the whole device transfer. The mold material used for this work is poly (urethaneacrylate) (PUA). The mold properties are such that it is rigid enough to withstand the pressure applied and yet flexible enough in its film form for large area applications. Onto a flat PUA mold with poly(ethyleneterephthalate) (PET) as a backing plane, a Teflon AF 2400 film (100 nm) was spin-coated. Gold is then deposited onto the Teflon coated mold by VD, followed by depositions of NPB, Alq_3 , LiF, and Al cathode in succession. The device thus fabricated was optimized green BOLED. The whole device on the flat mold is then brought into contact with a glass substrate. A pressure of 0.5 MPa was applied at 50°C for several minutes. When the mold is removed after cooling, the whole device on the flat mold was transferred onto the substrate. The substrate surface is cleaned bysonication in trichloroethylene, acetone, and isopropyl alcohol and then it is spin coated with a 100 nm thick PMMA film to increase the surface energy.

The effect of thin fluoro-acrylic polymer as an anode stabilizer on the lifetime of an OLED was

investigated. Surface properties of FP FC-722 (Fluorad™ of 3M) film on ITO were characterized by XPS. An OLED with 1 nm thick FP film showed identical brightness and efficiency behavior and improved operational stability compared with the reference device. The improvement of the lifetime was accompanied by the suppression of the voltage increase at the initial stage of constant-current driving, which can be attributed to the smoothing of the ITO surface by FP film [21].

OLEDs with Alq3 as a single-active layer were prepared by using a series of FP buffer layers. The OLEDs with a 10-nm-thick poly-(tetrafluoroethylene-perfluoroalkylvinylether) (PFA) layer had a current efficiency of 4.46 cd/A at a current density of 2000 A/m², where as conventional double-layer OLEDs with *N*, *N*-bis-1-naphthyl-*N*, *N*-diphenyl-1, 1-biphenyl-4,4-diamine (NPB) and Alq3 showed a current efficiency of only 3.81 cd/A at the same conditions. The action of the “insulating” FP buffer layers could be interpreted to enhance hole injection and improve carrier balance [22, 23].

The insertion of a thin PTFE film at the interface between poly(ethylene dioxythiophene):poly(styrene sulphonic acid),(PEDOT:PSS), and an electroluminescent polymer leads to improved device efficiency and longevity. The presence of the superficial dipole increases the effective work function of the anode and improves the charge balance which enhances the external quantum efficiency (EQE) of the devices by up to a factor of two without significant effects on the luminance levels. The insertion of the PTFE layer reduces the photoluminescence quenching at the PEDOT:PSS/polymer interface, however we show that the EQE enhancement is mainly due to a better confinement of minority carrier electrons in the active layer. The lifetime of the devices showed a remarkable increase correlated with the insertion of the PTFE layer. Such improvements are ascribed to the reduced electrochemical interaction between the electroluminescent polymer and PEDOT:PSS. The PTFE acts as a chemical zipper of two heterogeneous media can be used for charge balance [24].

Thin PTFE film, deposited from gas phase using a hot filament deposition method, was tested as protective layer for various electronic devices including OLED [25]. Among the different methods

the plasma polymerization of perfluorinated gas also are developing for OLED encapsulation by industrial companies, for example, Selvac [26].

OFET

The pentacene layer in an OFET was encapsulated with 1.5 μm thick film of PTFE by magnetron sputtering (MSp) and stored for 4 months in laboratory conditions. The on-current at −40VDS and −40VGS was reduced from an initial value of −6.2 mA to −1.1 mA after 4 months. Compared to unprotected samples, the rate of degradation was strongly reduced. A positive threshold voltage shift occurred, indicating that humidity can be excluded as a degradation factor. Oxygen may have diffused through the PTFE layer. Experiments revealed a positive threshold voltage shift due to the presence of oxygen [27, 28].

Threshold voltage of OFET was adjusted using a design similar to a dual-gate structure with an insulating Teflon electret layer as a second gate. The threshold voltage of a pentacene bottom gate OFET was shifted from +13.1 to −2.3 V by deposition of a 1.7 μm thick electret layer. This tuning of the threshold voltage compensated one of the main drawbacks of organic electronics and even allows switching from a depletion to non-enhancement-type transistor behavior [29].

Schematic of this device is shown in Figure 4.1. Copper phthalocyanine (CuPc) and Teflon(PTFE) were used as the semiconductor layer and dielectric layer in OFET (Fig. 4.2). The source and drain electrodes were made from ITO, the gate electrode – from Ag. The channel length between the source and drain was 50 nm. After preparing the source and drain electrodes by lithography, the CuPc layer, teflon layer and Ag layer were prepared by vacuum deposition sequentially. The field effect electron mobility of the device reached $1.1 \cdot 10^{-6}$ cm²/(V s), and the on/off current ratio reached 500 [30].

Deposited in vacuum polyamide-6/PTFE film was studied as a gate dielectric for flexible OFET (Fig. 4.3). The same deposition method was used for the formation of both organic semiconductor and gate dielectric films. The fabricated transistors showed good electrical characteristics. Ambipolar behavior was observed even when the device was operated in air [31].

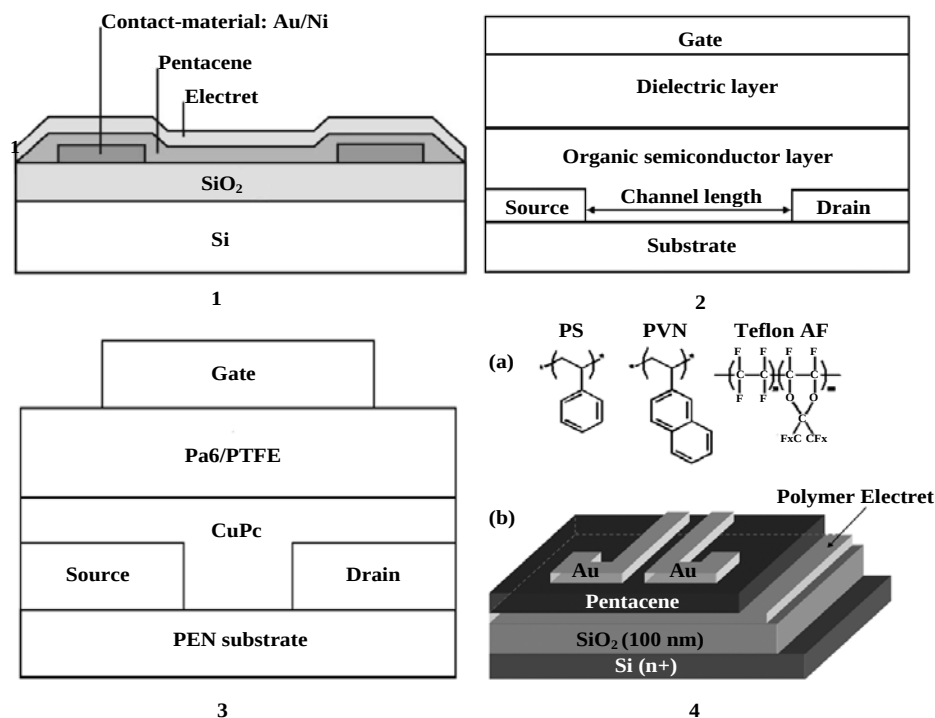


Fig. 4.

- 1) Schematic of the OFET structure [29];
- 2) The device structure of organic transistor [30];
- 3) Schematic cross section of the CuPc organic field effect transistor with PA6/PTFE gate insulator on an ITO PEN substrate. The channel length and width are 20 μm and 1 mm [31];
- 4) a - Various polymer electret materials, PS, PVN and Teflon;
b - Device configuration of the bottom gate/top contact PEM device [32].

Charge transfer and trapping characteristics of various dielectric layers: polystyrene (PS), poly(4-vinyl naphthalene) (PVN), and Teflon AF in non-volatile pentacene OFET memory devices were studied (Fig. 4.4). The degree of threshold voltage (V_{Th}) shifts (memory window), the programming and erasing bias, and the retention time, depended on the material of a charged layer. The pentacene OFETs with PVN or PS showed reversible positive and negative V_{Th} shifts by an application of external gate bias. In device with Teflon AF positive V_{Th} shift was obtained indicating an efficient electron injection whereas showed inefficient erasing characteristics via hole injection and storing due to a high electro-negative properties of fluorine units in the dielectric. This result indicates importance of a selection of the polymer dielectric to obtain efficient organic non-volatile memory with a long retention time [32].

Electrets

PTFE films, deposited by pulsed laser ablation, were found to be crystalline, with spherulite sizes adjustable over more than one order of magnitude by annealing. Films with large spherulites showed

excellent charge stability, comparable to industrial PTFE foils. Such thin PTFE films can be interesting for miniaturized electret devices [33].

A novel polymer electret was obtained by doping a silane-coupling reagent into the CYTOP polymer. Measurements of surface potential and thermally stimulated discharge spectra were made for various films, prepared with different silane concentrations. It was found that the surface charge density, charge stability and thermal resistibility of electric charges were improved by the doping. A surface charge density of 1.5 mC cm^{-2} , which is three times larger than that of Teflon AF, has been obtained on a 15 μm thick film. Power generation experiment was performed using the patterned CYTOP electret of 20 x 20 mm^2 [34]. By adding aminosilane derivatives into CYTOP, the films included aminosilane-based nanoparticles on copper substrate were formed. The formation of nanoparticles in the film was effective to improve the properties of electrets [35].

PV

As many of the achievements in the field of OLED and OFET were applied to organic photovoltaic devices design, the PFP films were tested for PV as well. As mentioned above, PTFE obtained by vacuum deposition is transparent in the ultraviolet, visible and near infrared (Fig. 5). It is known that the spectrum of solar radiation is within the 300-2500 nm [36]. In this region (300-1100 nm), most spectrally sensitive solar cells [2, 37, 38], such as silicon cells (Fig. 6) [5].

It makes it possible to assume that PTFE can be used as solar cell cover. But the radiation spectrum of the sun and the transmission range PTFE is a much wider range, so urgent expansion of the sensitivity of solar cells or use transmission methods of solar energy from long-wave range to the short,

for example, up-conversion [39].

Authors of [17] introduced the PTFE buffer layer into the organic photovoltaic devices (OPV). They investigated the effects of PTFE spacer on poly(3-hexylthiophene):phenyl-C61-butyric acid methyl ester (P3HT:PCBM) based organic PV devices by inserting thermally evaporated PTFE films between indium-tin-oxide (ITO) and P3HT:PCBM layers. Significant improvement in terms of open-circuit voltage, short-circuit current, and thereby in its commensurate power conversion efficiency is achieved compared to devices with poly(3,4-ethylenedioxythiophene):poly(styrene-sulfonate) layers. As it was demonstrated that the devices with PTFE buffer layer exhibited at least a 40% increase in terms of power conversion efficiency comparing with reference devices without

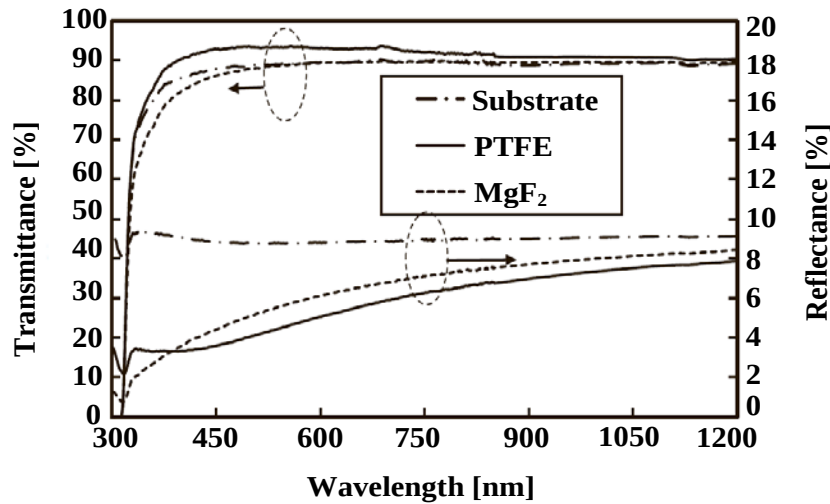


Fig. 5. Visible light transmittance and reflectance spectra of the fluorocarbon thin film (PTFE) and magnesium difluoride thin film (MgF_2) sputtered onto the PET film substrate.

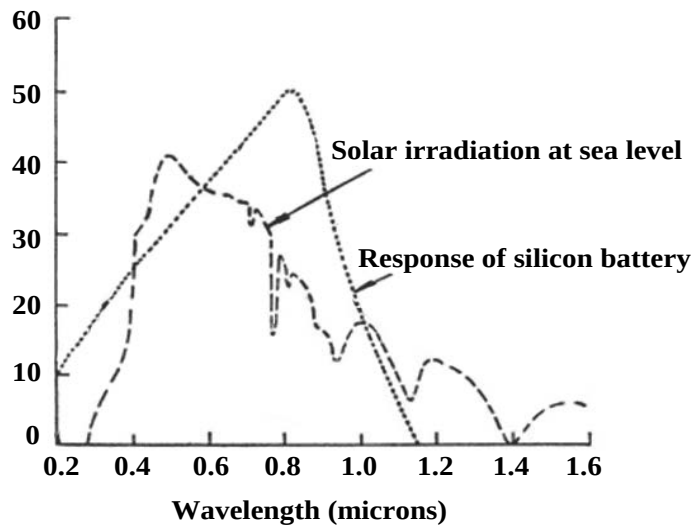


Fig. 6. Spectral energy distribution from Sun, and spectral response of silicon solar battery.

PTFE. Figure 6 shows the energy levels of the single components of the photovoltaic cell with a simple schematic of the ITO/PTFE interface. As in [15, 16] the fluorine component aligns on top of the ITO surface as shown in Fig. 7, creating a dipole surface with the dipole moment directed inward the ITO.

polyethyleneterephthalate (PET) layer. Under solar light irradiation (12 W/m^2) in a rainy day, the fabricated solar cell provides an open-circuit (V_{oc}) of 0.43 V and short-circuit current density (J_{sc}) of 4.2 A/m^2 . The TENG designed for collection of raindrop energy gave an AC V_{oc} of 30 V and J_{sc} of 4.2 mA/m^2

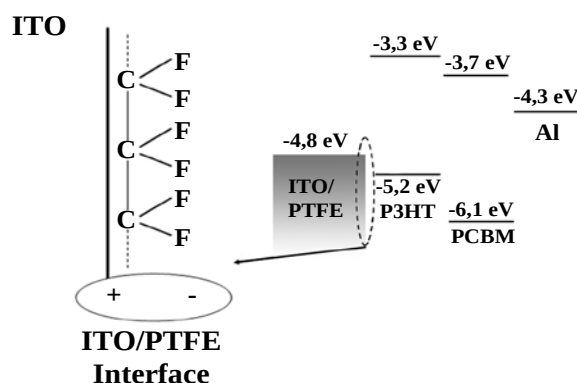


Fig. 7. Energy-level diagram shows the highest occupied molecular orbital and lowest unoccupied molecular orbital of each material in the OPV device. Inset: Schematic of the ITO/PTFE interface.

The PVs performance enhancement is attributed to the formation of an artificial dipole layer resulting from the rich, negatively charged fluorine that facilitates the hole extraction process. This reduces the energy barrier between the ITO and organic interface. This result showed the high potential of PTFE as a low cost and stable ITO buffer layer for PV devices. The use of a FP optical spacer with 250 nm thickness allowed an independent optimization of both the electronic and optical properties of the tandem solar cell. The optical transmission window of the bottom cell is optimized to match the optical absorption of the top cell by varying the layer thickness of the optical spacer. The two bulk heterojunction subcells have complementary absorption maxima at maximum wavelength 850 nm for the top cell and maximum wavelength 550 nm for the bottom cell. The subcells are electronically coupled in series or in parallel using four electrical contacts. The series configuration led to an open-circuit voltage of more, than 1 V, which is equal to the sum of both subcells. The parallel configuration leads to a high short-circuit current of 92 A/m^2 , which is equal to the sum of both subcells. The parallel configuration results in a much higher efficiency compared to the series configuration [40].

Protective layer, made from PTFE nanorods-composed film, was used in the transparent triboelectric nano-generator (TENG) for simultaneously or individually harvesting solar and raindrop energy. The TENG was made of a specially produced PTFE film, an ITO and a

when impacted by water drops at a dripping rate of 0.116 ml/s. In rainy days, the performance of solar cell decreased, while TENG can be a good compensation as for green energy harvesting. The hybrid cell formed by a solar cell and a water-drop TENG has great potential for harvesting both solar energy and raindrop electrostatic energy under different weather conditions [41].

A method for producing superhydrophobic nanograss-coated (SNGC) glass surfaces that possess both reduced reflectivity and self-cleaning properties at the air/glass interface was developed. The refractive index of a CaF_2 nanograss(NG) layer on glass substrate, deposited by glancing angle vapor deposition, was 1.04 at 500 nm, which is the second-lowest value ever reported so far. The PTFE-coated NG layer gives rise to a high water contact angle ($>150^\circ$) and efficient cleaning out of dust with water drops. The superhydrophobic organic PV cell with excellent power conversion efficiency was demonstrated [42].

Conclusions

Thanks to their unique optical and electrical properties, thin films obtained by vacuum deposition are used in OLED, OFET, electrets, PV and sensors. It allows to enhance useful optoelectronics properties and working time as well.

Список використаних джерел

1. Yassien, K. Opto-Mechanical Properties of PTFE Fibres Using Phase Shifting Interferometry / K. Yassien, M. Bakary. // *Optics and Photonics Journal*. – 2014. – Vol. 4. –P.153-163.
2. Dillon, M. Silicone and Poly(tetrafluoroethylene) Interpenetrating Polymer Networks - Brief History, Summary of Recent Developments, and Discussion of Applications / M. Dillon // *Advances in Chemistry*. – 1994. –Vol. 239. –P.3-38.
3. Паншин Ю. А. Фторопласты. / Ю. А. Паншин, С. Г. Малкевич, Ц. С. Дунаевская. –Ленинград: Химия, 1978. –456 с.
4. Каргин В.А. Энциклопедия полимеров. / В.А. Каргин та ін. –Москва: Советская Энциклопедия, 1972. –1224 с.
5. Iwamori, S. Optical property of fluorocarbon thin films deposited onto polyester film substrate by an r.f. sputtering / S. Iwamori, K. Noda // *Materials Letters*. – 2012. –Vol. 66. –№1. –P.349–352.
6. Kim, H.-M. Transparent and super-hydrophobic properties of PTFE films coated on glass substrate using RF-magnetron sputtering and Cat-CVD methods / H.-M. Kim, S. Sohn, J.-S. Ahn // *Surface & Coatings Technology*. – 2012. –Vol. 228. –P.389-392.
7. Офіційний сайт компанії TYDEX - TYDEXOPTICS Terahertz materials [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: http://www.tydexoptics.com/pdf/ru/Thz_Materials.pdf.
8. Galante, A.M.S. Study on application of PTFE, FEP and PFA fluoropolymers on radiation dosimetry / A.M.S. Galante, O. Galante, L. Campos // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*. – 2013. – Vol. 619. –P.177-182.
9. T. Wentik, W. Planet (1960) Report: Infrared transmission and emission of teflon [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: <http://www.dtic.mil/dtic/tr/fulltext/u2/606104.pdf>.
10. Gandakari, S. Solid state sensors for toxic gases / [S. Gandakari, M. Kaur, V. R. Katti et al.] // *Founders day special issue*. – 2005. –P.49-60.
11. Grandin, H.M. Plasma treatment of the Mg:Ag/tris-(8-hydroxyquinoline) aluminum interface in OLEDs: effects on adhesion and performance / H. M. Grandin, K. Griffiths, P. R. Norton // *Applied Surface Science*. – 2004. –Vol. 230. –P.163-171.
12. Kim, W.-J. Electrical characteristics of OLEDs with the thickness variation of buffer layer / [W.-J. Kim, Y.-H. Lee, J.-H. Yang et al.] // *Proc. Internat. Symp. Electrical Insulating Materials*. – 2005. –Vol. 3. –P.640-643.
13. Lee, Y. Dependence of the Dielectric Properties of OLEDs / [Y. Lee, W. Kim, K. Cho et al.] // *Journal of the Korean Physical Society*. – 2008. –Vol. 53. –№3. – P.1460-1463.
14. Lee, Y.-H. Electrical and Optical Characteristics of Organic Light-Emitting Diodes for Various Thicknesses of the PTFE Layer / [Y.-H. Lee, W.-J. Kim, T.-Y. Kim et al.] // *Journal of the Korean Physical Society*. – 2007. –Vol. 51. – №3. –P.1016-1018.
15. Tong, S.W. Ultraviolet photoelectron spectroscopy investigation of interface formation in an indium-tin oxide/fluorocarbon/organic semiconductor contact / [S.W. Tong, K.M. Lau, H.Y. Sun et al.] // *Applied Surface Science*. – 2006. –Vol. 252. –№10. –P.3806-3811.

References

1. YASSIEN, K. & BAKARY, M. (2014) Opto-Mechanical Properties of PTFE Fibres Using Phase Shifting Interferometry. *Optics and Photonics Journal*. (4). p. 153-163.
2. DILLON, M. (1994) Silicone and Poly(tetrafluoroethylene) Interpenetrating Polymer Networks - Brief History, Summary of Recent Developments, and Discussion of Applications. *Advances in Chemistry*. 239. p.3-38.
3. PANSHIN, YU., MALKEVICH, S. and DUNAEVSKAYA, T., (1978) *Fluoroplasts*. Leningrad: Chimya.
4. KARGIN, V. A. et al. (1972) *Encyclopedia Polymerov*. Moscow: *Sovetskaya Encyclopedia*.
5. IWAMORI, S. & NODA, K. (2012) Optical property of fluorocarbon thin films deposited onto polyester film substrate by an r.f. sputtering. *Materials Letters*. 66. p.349–352.
6. KIM, H.-N. & SOHN, S & AHN, J.-S. (2013) Transparent and super-hydrophobic properties of PTFE films coated on glass substrate using RF-magnetron sputtering and Cat-CVD methods. *Surface & Coatings Technology*. 228. p.389-392.
7. TYDEXOPTICS Terahertz materials [Online] Available from: http://www.tydexoptics.com/pdf/ru/Thz_Materials.pdf.
8. GALANTE, A.M.S. & GALANTE, O. & CAMPOS, L. (2013) Study on application of PTFE, FEP and PFA fluoropolymers on radiation dosimetry. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*. 619. p.177-180.
9. WENTIK, T. & PLANET, W. (1960) Infrared transmission and emission of teflon. [Online] Available online: <http://www.dtic.mil/dtic/tr/fulltext/u2/606104.pdf>.
10. GANDKARI, S. & KAUR, M. & KATTI, V. & BHANDARKAR, V. & MUTHE, K. (2005) *Solid state sensors for toxic gases*. Founders day special issue. p.49-60.
11. GRANDIN, H.M. & GRIFFITHS, K. & NORTON, P.R. (2004) Plasma treatment of the Mg:Ag/tris-(8-hydroxyquinoline) aluminum interface in OLEDs: effects on adhesion and performance. *Applied Surface Science*. 230. p.163-171.
12. KIM, W.-J. & LEE, Y.-H. & YANG, J.-H. & KIM, G.-Y. & LEE, C.-H. & CHO, K.-B. HONG, J.-W. (2005) Electrical characteristics of OLEDs with the thickness variation of buffer layer. *Proc.Internat.Symp. Electrical Insulating Materials*, 5-9 June 2005. 3. p.640-643.
13. LEE, Y. & KIM, W. & CHO, K. ET AL. (2008) Dependence of the Dielectric Properties of OLEDs. *Journal of the Korean Physical Society*. 53 (3). p.1460-1463.
14. LEE, Y.-H. & KIM, W.-J. & KIM, T.-Y. & HONG, J.-W. & KIM, T.-W. (2007) Electrical and Optical Characteristics of Organic Light-Emitting Diodes for Various Thicknesses of the PTFE Layer. *Journal of the Korean Physical Society*. 51(3). p.1016-1018.
15. TONG, S. W. & LAU, K. M. & SUN, H. Y. & FUNG, M. K. & LEE, C. S. & LIFSHITZ, Y. & LEE, S. (2006) Ultraviolet photoelectron spectroscopy investigation of interface formation in an indium-tin oxide/fluorocarbon/organic semiconductor contact. *Applied Surface Science*. 252(10). p.3806-3811.

16. Park, H. Polytetrafluoroethylene (PTFE) for a Hole-Injection Layer in Organic Light-Emitting Diodes / [H. Park, S.-H. Kim, S.-H. Jee et al.] // *Journal of the Korean Physical Society*. – 2008. –Vol. 53. –№3. –P.1710-1714.
17. Kang, B. Fluoropolymer indium-tin-oxide buffer layers for improved power conversion in organic photovoltaics / B. Kang, L.W. Tan, S.R.P. Silva // *Applied Physics Letters*. – 2008. –Vol. 93. –P.133302.
18. Kemerink, M. Three-Dimensional Inhomogeneities in PEDOT:PSS Films / [M. Kemerink, S. Timparano, M.M. De Kok et al.] // *Journal of Physical Chemistry B*. – 2004. –Vol. 108. –№49. –P.18820-18825.
19. Chen, S. Influence of the hole injection layer on the luminescent performance of organic light-emitting diodes / S.-F. Chen, C.-W. Wang // *Applied Physics Letters*. – 2004. –Vol. 85. –№5. –P.765-767.
20. Kim, K.-H. Inverted top-emitting organic light-emitting diodes by whole device transfer / [K.-H. Kim, S.-Y. Huh, S.-M. Seo et al.] // *Organic Electronics*. – 2008. –Vol. 9. –№6. –P.1118-1121.
21. Yang, N.M. Ultra-thin fluoropolymer buffer layer as an anode stabilizer of organic light emitting devices / [N.M. Yang, J. Lee, M.-W. Song et al.] // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2007. –Vol. 40. –P.4466-4470.
22. Gao, Y. Bright single-active layer small-molecular organic light-emitting diodes with a polytetrafluoroethylene barrier / [Y. Gao, L. Wang, D. Zhang et al.] // *Applied Physics Letters*. – 2003. –Vol. 82. –№2. –P.155-157.
23. Wang, H. F. Efficient single-active-layer OLEDs with fluoropolymer buffer layers / [H. F. Wang, L. D. Wang, Z. X. Wu et al.] // *Applied Physics Letters*. – 2006. –Vol. 88. –P.131113.
24. Latini, G. Superficial fluoropolymer layers for efficient light-emitting diodes / [G. Latini, L. W. Tan, F. Cacialli et al.] // *Organic Electronics*. – 2012. –Vol. 13. –№6. –P.992-998.
25. Lewis, H. Low-Energy, Solventless Coating Processes / Lewis, H., Handy, E., Gleason, K. // *Nanotech 2008 - 11th Annual NSTI Nanotechnology Conference and Trade Show* – Nanotech 2008, Boston, Massachusetts, USA: clean Technology and Sustainable Industries Organization (CTSI).
26. Tulkoff, C. and Hillman, C. (2013) *Understanding Nanocoating Technology*. Electronic System Technologies Conference and Exhibition (ESTC). Las Vegas, USA. [Электронный ресурс] – Режим доступа до ресурсу: <https://www.scribd.com/document/324052014/ESTC-Hillman-Understanding-New-Coating-Tech-pdf>.
27. Pannemann, C. PTFE-Encapsulation for Pentacene based organic Thin-Film Transistors / [C. Pannemann, T. Diekmann, U. Hilleringmann et al.] // *Materials Science*. – 2007. –Vol. 25. –№1. –P.95-101.
28. Pannemann, C. (2006) *Prozesstechnik für organische Feldeffekt Transistoren: Kontakte, Dielektrika und Oberflächenpassivierungen*, PhD thesis, Paderborn: Paderborn University [Электронный ресурс] – Режим доступа до ресурсу: <http://digital.ub.uni-paderborn.de/hsmig/content/titleinfo/4298>.
29. Scharnberg, M. Tuning the threshold voltage of organic field-effect transistors by electret-encapsulating layer / [M. Scharnberg, V. Zaporozhchenko, R. Adelung et al.] // *Applied Physics Letters*. – 2007. –Vol. 90. –P.013501.
16. PARK, H. & KIM, S.-H. & JEE, S.-H. & YOON, Y.-S. & LEE, S.-J. & CHAE, H.-B. (2008) Polytetrafluoroethylene (PTFE) for a Hole-Injection Layer in Organic Light-Emitting Diodes. *Journal of the Korean Physical Society*. 53(3). p.1710-1714.
17. KANG, B. & TAN, L.W. & SILVA, S.R.P. (2008) Fluoropolymer indium-tin-oxide buffer layers for improved power conversion in organic photovoltaics. *Applied Physics Letters*. 93. p. 133302.
18. KEMERINK, M. & TIMPARANO, S. & DE KOK, M.M. & MEULENKAMP, E.A. & TOUWSLAGER, F.J. (2004) Three-Dimensional Inhomogeneities in PEDOT:PSS Films. *Journal of Physical Chemistry B*. 108(49). p.18820-18825.
19. CHEN, S.-F. & WANG, C.-W. (2004) Influence of the hole injection layer on the luminescent performance of organic light-emitting diodes. *Applied Physics Letters*. 85(5). p.765-767.
20. KIM, K.-H. & HUH, S.-Y. & SEO, S.-M. & LEE, H.-H. (2008) Inverted top-emitting organic light-emitting diodes by whole device transfer. *Organic Electronics*. 9(6). p.1118-1121.
21. YANG, N. M. & LEE, J. & SONG, M.-W. & AHN, N. & KIM, M.-H. & LEE, S. CHIN, B. D. (2007) Ultra-thin fluoropolymer buffer layer as an anode stabilizer of organic light emitting devices. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 40. p.4466-4470.
22. GAO, Y. & WANG, L. & ZHANG, D. & DUAN, L. & DONG, G. & QIU, Y. (2003) Bright single-active layer small-molecular organic light-emitting diodes with a polytetrafluoroethylene barrier. *Applied Physics Letters*. 82(2). p.155-157.
23. WANG, H. F. & WANG, L.D. & WU, Z. X. & ZHANG, D. Q. & QIAO, J. & QIU, Y. & WANG, X. G. (2006) Efficient single-active-layer OLEDs with fluoropolymer buffer layers. *Applied Physics Letters*. 88. p.131113.
24. LATINI, G. & TAN, L.W. & CACIALLI, F. & SILVA, S.R.P. (2012) Superficial fluoropolymer layers for efficient light-emitting diodes. *Organic Electronics*. 13(6). p.992-998.
25. LEWIS, H. and HANDY, E. and GLEASON, K. (2008) Low-Energy, Solventless Coating Processes. *Nanotech 2008 - 11th Annual NSTI Nanotechnology Conference and Trade Show (Nanotech 2008)*. Boston, Massachusetts, USA. 2008. Reading: Clean Technology and Sustainable Industries Organization (CTSI).
26. TULKOFF, C. and HILLMAN, C. (2013) *Understanding Nanocoating Technology*. Electronic System Technologies Conference and Exhibition (ESTC). Las Vegas, USA. [Online] Available online: <https://www.scribd.com/document/324052014/ESTC-Hillman-Understanding-New-Coating-Tech-pdf>.
27. PANNEMANN, C. & DIEKMANN, T. & HILLERINGMANN, U. & SCHURMANN, U. & SCHAMBERG, M. & ZAPOROZHTCHENKO, V. & ADELUNG, R. & FAUPEL, F. (2007) PTFE-Encapsulation for Pentacene based organic Thin-Film Transistors. *Materials Science*. 25(1). p.95-101.
28. PANNEMANN, C. (2006) *Prozesstechnik für organische Feldeffekt Transistoren: Kontakte, Dielektrika und Oberflächenpassivierungen*. A Thesis Submitted in partial fulfilment of the Requirements of Paderborn University for the Degree of Doctor of Philosophy. Paderborn: Paderborn University.
29. SCHARNBERG, M. & ZAPOROZHTCHENKO, V. & ADELUNG, R. & FAUPEL, F. & DIEKMANN, T. & HILLERINGMANN, U. (2007) Tuning the threshold voltage of organic field-effect transistors by electret-encapsulating layer. *Applied Physics Letters*. 90. p.013501.

30. Yong, Q. Preparation of organic thin-film field effect transistor / [Q. Yong, H. Yanchuan, D. Guifang et al.] // *Chinese Science Bulletin*. – 2002. –Vol. 47. –№18. – P.1529-1532.
31. Shung-Yang, Y. Electrical Characteristics of Copper Phthalocyanine Thin-Film Transistors with Polyamide-6/Polytetrafluoroethylene Gate Insulator / Y. Shung-Yang, H. Shi-Ai, M. Dong-Ge // *Chinese Physics Letters*. – 2007. –Vol. 24. –№12. –P.3513-3515.
32. Baeg, K.-J. Charge transfer and trapping properties in polymer gate dielectrics for non-volatile organic field-effect transistor memory applications / K.-J. Baeg, Y.-Y. Noh, D.-Y. Kim // *Solid State Electronics*. – 2009. –Vol. 53. –P.1165-1168.
33. Schwodiauer, R. Charge stability of pulsed-laser deposited polytetrafluoroethylene film electrets / [R. Schwodiauer, S. Bauer-Cogonea, S. Bauer et al.] // *Applied Physics Letters*. – 1998. –Vol. 73. –№20. – P.2941-2943.
34. Sakane, Y. The development of a high-performance perfluorinated polymer electret and its application to micro power generation / Y. Sakane, Y. Suzuki, N. Kasagi // *Journal of Micromechanics and Microengineering*. – 2008. –Vol. 18. –P.104011(1-6).
35. Kashiwagi, K. Nano-cluster-enhanced High-performance Perfluoro-polymer Electrets for Micro Power Generation / Kashiwagi K., Okano K., Morizawa Y., Suzuki Y. // 10th Int. Workshop on Micro and Nanotechnology for Power Generation and Energy Conversion Applications (PowerMEMS 2010), Leuven, Belgium: abstracts. – Leuven. – 2010. – P. 169-172.
36. A. Darmont (2009) Spectral Response of Silicon Image Sensors [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: www.aphesa.com/downloads/download2.php?id=1.
37. Hilsun, C. Progress in developing solar batteries / C. Hilsun // *New Scientist Journal*. – 1960. –Vol. 7. –№165. –P.96-99.
38. Litovchenko, V. G. Surface photovoltage spectroscopy research of solar silicon recombination parameters / V. G. Litovchenko // *Ukrainian Journal of Physics*. – 2015. – Vol. 60. –№10. –P.1036-1041.
39. Zhao, J. Triplet-triplet annihilation based upconversion: from triplet sensitizers and triplet acceptors to up-conversion quantum yields / J. Zhao, S. Ji, H. Guo // *RSC Advances*. – 2011. –Vol. 1. –P.937-950.
40. Hadipour, A. Solution-processed organic tandem solar cells with embedded optical spacers / A. Hadipour, B. De Boer, P. Blom // *Journal of Applied Physics*. – 2015. –Vol. 102. –P.074506.
41. Zheng, L. Silicon-based hybrid cell for harvesting solar energy and raindrop electrostatic energy / [L. Zheng, Z. Lin, G. Cheng, W. Wu et al.] // *Nano Energy*. – 2014. –Vol. 9. –P.291-300.
42. Gwong, H.-J. Superhydrophobic and antireflective nanoglass-coated glass for high performance solar cells / [H.-J. Gwong, Y. Park, C.-W. Moon et al.] // *Nano Research*. – 2014. –Vol. 7. –№5. –P.670-678.
30. YONG, Q. & YANCHUAN, H. & GUIFANG, D. & LIDUO, W. & YUDI, G. (2002) Preparation of organic thin-film field effect transistor. *Chinese Science Bulletin*. 47(18). p.1529-1532.
31. SHUNG-YANG, Y. & SHI-AI, H. & DONG-GE, M. (2007) Electrical Characteristics of Copper Phthalocyanine Thin-Film Transistors with Polyamide-6/Polytetrafluoroethylene Gate Insulator. *Chinese Physics Letters*. 24(12). p.3513-3515.
32. BAEG, K.-J. & NOH, Y.-Y. & KIM, D.-Y. (2009) Charge transfer and trapping properties in polymer gate dielectrics for non-volatile organic field-effect transistor memory applications. *Solid State Electronics*. 53. p.1165-1168.
33. SCHWODIAUER, R. & BAUER-COGONEA, S. & BAUER, S. & HEITZ, J. & ARENHOLZ, E. & BAUERLE, D. (1998) Charge stability of pulsed-laser deposited polytetrafluoroethylene film electrets. *Applied Physics Letters*. 73(20). p.2941-2943.
34. SAKANE, Y. & SUZUKI, Y. & KASAGI, N. (2008) The development of a high-performance perfluorinated polymer electret and its application to micro power generation. *Journal of Micromechanics and Microengineering*. 18(104011). p.1-6.
35. KASHIWAGI, K. and OKANO, K. and MORIZAWA, Y. and SUZUKI, Y. (2010) Nano-cluster-enhanced High-performance Perfluoro-polymer Electrets for Micro Power Generation. 10th Int. Workshop on Micro and Nanotechnology for Power Generation and Energy Conversion Applications (PowerMEMS 2010). Leuven. 2010. p.169-172.
36. DARMONT, A. (2009) *Spectral Response of Silicon Image Sensors*. [Online] April 2009. Available from: www.aphesa.com/downloads/download2.php?id=1.
37. HILSUM, C. (1960) Progress in developing solar batteries. *New Scientist Journal*. 7(165). p.96-99.
38. LITOVCHENKO, V. G. (2015) Surface photovoltage spectroscopy research of solar silicon recombination parameters. *Ukrainian Journal of Physics*. 60(10). p.1036-1041.
39. ZHAO, J. & JI, S. & GUO, H. (2011) Triplet-triplet annihilation based upconversion: from triplet sensitizers and triplet acceptors to upconversion quantum yields. *RSC Advances*. 1. p.937-950.
40. HADIPOUR, A. & DE BOER, B. & BLOM, P. (2007) Solution-processed organic tandem solar cells with embedded optical spacers. *Journal of Applied Physics*. 102. p.074506.
41. ZHENG, L. & LIN, Z. & CHENG, G. & WU, W. & WEN, X. & LEE, S. & WANG, Z. (2014) Silicon-based hybrid cell for harvesting solar energy and raindrop electrostatic energy. *Nano Energy*. 9. p.291-300.
42. GWON, H.-J. & PARK, Y. & MOON, C.-W. & NAHM, S. & YOON, S.-J. & KIM, S.-Y. & JANG, H.-W. (2014) Superhydrophobic and antireflective nanoglass-coated glass for high performance solar cells. *Nano Research*. 7(5). p.670-678.

Надійшла до редколегії 20.03.17

УДК 536.21.

Курилюк В. В.¹, к.ф.-м.н., доц.,
Кріт О. М.², к.ф.-м.н., н.с.,
Суховерська Н. М.³, лаб.

Вплив деформації на теплопровідність SiGe гетероструктур з квантовими точками

^{1,2,3}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: ¹kuryluk@univ.kiev.ua,
²krit@univ.net.ua
³snn84@ukr.net

V. V. Kuryliuk¹, PhD., As.Prof.,
O. M. Krit², PhD. Sci.Res.,
N. M. Sukhovska³, Lab.

Strain effects on thermal conductivity of SiGe heterostructures with quantum dots

^{1,2,3}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,

e-mail: ¹kuryluk@univ.kiev.ua,
²krit@univ.net.ua
³snn84@ukr.net

В роботі використано метод нерівноважної молекулярної динаміки для дослідження впливу деформацій на теплопровідність SiGe гетероструктур з квантовими точками. Для моделювання теплопровідності кремній-германієвих гетероструктур застосовано емпіричні потенціали Стілінджера-Вебера і Терзоффа. Вивчалися залежності коефіцієнта теплопровідності від гідростатичної та одновісної деформацій. Показано, що теплопровідність SiGe гетероструктур неперервно зменшується (збільшується) при зміні гідростатичної (одновісної) деформації від деформації стиснення до деформації розтягу. Для з'ясування фундаментальних фізичних механізмів проаналізовано швидкості та теплоємність, пов'язані з фононними модами. Також розраховано теплопровідність SiGe гетероструктур при $T=300$ K з різним об'ємним вмістом квантових точок. Встановлено, що теплопровідність гетероструктур нелінійно зменшується при зростанні об'ємної частки нановключень. Отриманий результат пояснюється зростанням ймовірності фононного розсіювання на границях поділу. Виявлені в роботі закономірності є важливими для термоелектричних застосувань SiGe гетероструктур з квантовими точками.

Ключові слова: теплопровідність, гетероструктура, квантова точка, молекулярна динаміка.

In this paper, non-equilibrium molecular dynamics simulations are employed to study the effects of strain on the thermal conductivity of SiGe heterostructures with quantum dots. The Stillinger–Weber and Tersoff interatomic potentials are employed to simulate thermal conductivity of SiGe heterostructures. Dependence of the thermal conductivity on hydrostatic and uniaxial strain is studied. The thermal conductivity of the strained SiGe heterostructures is shown to decrease (increase) continuously when the hydrostatic (uniaxial) strain changes from compressive to tensile. To achieve a fundamental understanding of the physical mechanisms, mode-specific group velocities of phonons and the specific heat of each propagating phonon modes are analyzed in details. We calculated also the thermal conductivity of SiGe heterostructures with different volumetric ratio of quantum dots at 300 K. It is found that by raising the volumetric ratio of nanoinclusions, thermal conductivity of heterostructures decreases nonlinearly. The decreasing thermal conductivity is due to the increased phonon scattering at high surface to volumetric ratio. Our findings are important for the thermal management in SiGe-based electronic devices and for thermoelectric applications of quantum dot heterostructures.

Key Words: thermal conductivity, heterostructure, quantum dot, molecular dynamics.

Статтю представив чл.-кор. НАНУ, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

На сьогодні кремній-германієві гетероструктури з квантовими точками розглядаються як перспективні матеріали для

розробки термоелектричних перетворювачів енергії [1]. Оскільки ефективність термоелектричного перетворення обернено пропорційна до теплопровідності [2], то низка сучасних досліджень в даній галузі спрямована

на пошук методів контрольованого зниження теплопровідності матеріалів без суттєвої зміни його електропровідності [3]. Одним з таких методів впливу може розглядатись деформація. Зокрема, наявні дані вказують на можливість деформаційного тюнінгу коефіцієнта теплопровідності квантових ниток, кремнієвих наноплівочок та моношарів (силіцен) [4-6].

В даній роботі з використанням методу молекулярної динаміки (МД) проведено моделювання процесів теплоперенесення в SiGe гетероструктурах з квантовими точками (КТ) під дією зовнішньої деформації. Розглянуто вплив гідростатичної та одновісної деформацій на коефіцієнт теплопровідності структур.

Методика розрахунків

Для розрахунку коефіцієнта теплопровідності k використовувався метод нерівноважної молекулярної динаміки з алгоритмом Мюллер-Плате. Деталі методу викладено в роботі [7]. Моделювана комірка складалась з кремнієвої матриці розмірами $10 \times 10 \times 100$ в одиницях сталої ґратки Si з нановключеннями Ge кубічної форми. Вказана структура спочатку витримувалась впродовж 10 нс при сталих температурі та тиску для релаксації внутрішніх напружень, після чого виконувався розрахунок теплопровідності k . Кожне значення k отримувалось шляхом усереднення результатів 10 незалежних моделювань. Всі розрахунки виконувались за допомогою програмного пакету молекулярної динаміки LAMMPS.

Результати та обговорення

На першому етапі роботи проводилось тестування потенціалів міжатомної взаємодії Стіллінджера-Вебера (SW) [8] та Терзоффа [9] на точність опису теплопровідності k монокристалічних Si та Ge. Результати МД-моделювання співставлялись з експериментальними залежностями $k(T)$, отриманими авторами роботи [10]. Як видно з рис.1, теоретичні значення k в усьому діапазоні досліджуваних температур лежать вище, ніж експериментальні. Це пов'язано з тим, що при моделюванні нами розглядався ідеальний кристал без жодних дефектів, тоді як реальні кристали завжди містять певну концентрацію точкових дефектів та дислокацій. Вказані фактори слугують джерелом додаткового розсіювання фононів, що зумовлює зниження коефіцієнта теплопровідності. З отриманої

залежності на рис.1 видно, що потенціал Терзоффа при однакових умовах дає краще узгодження теоретичної та експериментальної залежностей. Оскільки аналогічні результати були отримані і при моделюванні теплопровідності германію, то потенціал Терзоффа було обрано для моделювання SiGe гетероструктур з квантовими точками.

Розрахунок теплопровідності k гетероструктур SiGe в залежності від об'ємної частки η германієвих КТ виявив, що збільшення

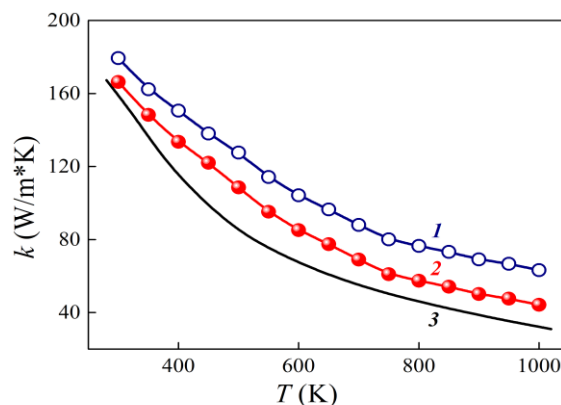


Рис. 1. Розрахована температурна залежність коефіцієнта теплопровідності кристалу Si з потенціалами SW (1) і Терзоффа (2) у порівнянні з експериментом (3) [10]

об'ємної частки Ge проявляється в різкому зменшенні коефіцієнта теплопровідності (рис.2). При подальшому зростанні η , величина k починає повільно зростати.

Різке зменшення k при збільшенні η можна пояснити збільшенням площі границь поділу, на яких відбувається розсіювання фононів. В той же

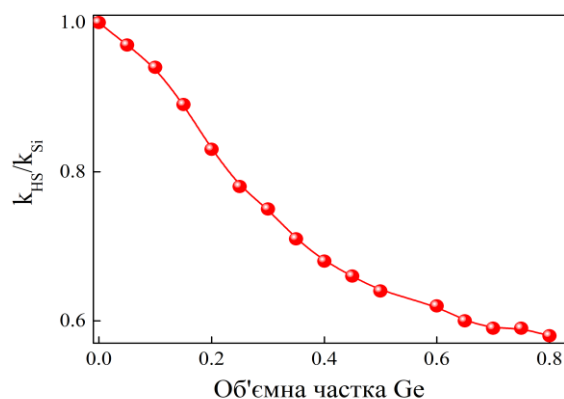


Рис. 2. Розрахована концентраційна залежність коефіцієнта теплопровідності SiGe гетероструктури з КТ при $T=300$ K

час, повільне зростання коефіцієнта k при подальшому зростанні частки КТ може бути пов'язане з формуванням неперервних

ланцюжків квантових точок, через які частина фононів поширюється без розсіювання.

На рис. 3 представлено результати розрахунку зміни відносної теплопровідності структури SiGe з об'ємною часткою КТ $\eta=0.5$ при $T=300$ К в залежності від величини і знаку одновісної деформації. Видно, що при одновісній деформації стиснення вздовж напрямку поширення тепла відбувається зниження теплопровідності структури, яке проявляється тим сильніше, чим більшою є деформація стиснення. Зі зміною знаку одновісної деформації, тобто при розтягу досліджуваного зразка, спостерігається зворотний ефект – зростання коефіцієнта теплопровідності.

На рис.4 представлено результати моделювання теплопровідності досліджуваної структури при дії гідростатичної деформації. Дія

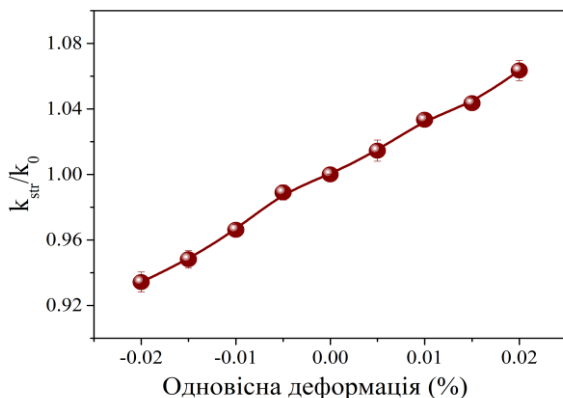


Рис. 3. Розрахована залежність коефіцієнта теплопровідності гетероструктури SiGe з КТ ($\eta=0.5$) під дією одновісної деформації

гідростатичної деформації стиснення проявляється в зростанні коефіцієнта теплопровідності матеріалу, тоді як всебічний розтяг досліджуваного композиту результується, навпаки, в зменшенні теплопровідності. Порівняння результатів, приведених на рис.3 та рис. 4 свідчить про те, що вплив одновісної та гідростатичної деформації на теплопровідність SiGe структури з квантовими точками при фіксованій об'ємній частці германієвих нановключень має протилежний характер.

Для пояснення деформаційних залежностей коефіцієнта теплопровідності k врахуємо, що величина k згідно кінетичної теорії визначається як $k=\lambda C v/3$, де λ - довжина вільного пробігу фононів, v - їхня швидкість, C - теплоємність кристалу. При всебічному стисненні відстань між атомами зменшується, що веде до зростання жорсткості χ міжатомних зв'язків. Враховуючи,

що частота коливань ω атомів в кристалі пропорційна до величини χ , приходимо до висновку, що деформація всебічного стиснення зумовлюватиме зростання ω . Оскільки згідно теорії теплоємності величина $C \sim \omega$, то вказані ефекти зумовлюватимуть збільшення C , в результаті чого зростатиме і теплопровідність k матеріалу. Іншим фактором, що визначає зростання k при всебічному стисненні матеріалу є збільшення швидкості поздовжніх і поперечних фононів, спричинене зменшенням міжатомних відстаней. Ефект зменшення коефіцієнта теплопровідності при дії гідростатичного розтягу можна пояснити виходячи з аналогічних міркувань.

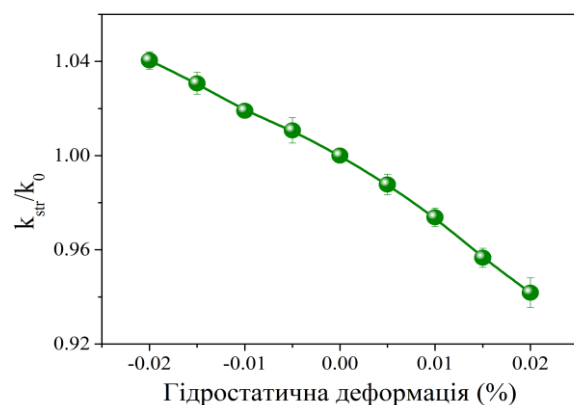


Рис. 4. Розрахована залежність коефіцієнта теплопровідності гетероструктури SiGe з КТ ($\eta=0.5$) під дією гідростатичної деформації

При поясненні впливу одновісної деформації на коефіцієнт теплопровідності гетероструктур врахуємо, що зміна розміру зразка в одному з напрямків веде до протилежної зміни двох інших розмірів. Тому при одновісному стисненні матеріалу, відстань між атомами в двох інших напрямках буде збільшуватись, зумовлюючи зменшення швидкості поширення поперечних фононів та зменшення теплоємності матеріалу. З урахуванням виразу для k це приводитиме і до зменшення коефіцієнта теплопровідності.

Висновки

Отже, отримані в роботі результати молекулярно-динамічного моделювання процесів теплоперенесення в SiGe гетероструктурах з квантовими точками демонструють можливість зниження коефіцієнта теплопровідності шляхом варіації об'ємного вмісту германієвих нановключень, а також можливість керованої зміни коефіцієнта теплопровідності за

допомогою зовнішньої деформації. Цей факт може бути використаний при проектуванні пристроїв на основі наноматеріалів, зокрема, термоелектричних перетворювачів підвищеної

енергоефективності на основі напівпровідникових гетероструктур.

Список використаних джерел

1. High quality multifold Ge/Si/Ge composite quantum dots for thermoelectric materials / [H.-T. Chang, C.-C. Wang, J.-C. Hsu та ін.] // *Appl.Phys.Lett.* – 2013. – 102(10). – C.101902-1 - 101902-5.
2. Nanostructured thermoelectrics / [P. Pichanusakorn, P. Bandaru] // *Mat.Sci.Eng.* – 2010. – R67 (2-4). – C. 19 - 63.
3. Precise control of thermal conductivity at the nanoscale through individual phonon-scattering barriers / [G. Pernot, M. Stoffel, I. Savic, та ін.] // *Nature Materials.* – 2010. – 9 (6). – C.491 - 495.
4. Effects of vacancy defects and axial strain on thermal conductivity of silicon nanowires: A reverse nonequilibrium molecular dynamics simulation / [M. Shahraki, Z. Zeinali] // *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* – 2015. – 85 (1). – C.233 - 238.
5. Isotope and strain effects on thermal conductivity of silicon thin film / [Z. Yang, R. Feng, F. Su, та ін.] // *Physica E.* – 2014. – 64 (4). – C.204 - 210.
6. Tensile strains give rise to strong size effects for thermal conductivities of silicene, germanene and stanene / [Y. Kuang, L. Lindsay, Q. Shi, G. Zheng] // *Nanoscale.* – 2016. – 8 (1). – C.3760 - 3767.
7. Atomistic simulation of the thermal conductivity in amorphous SiO₂ matrix/Ge nanocrystal composites / [V. Kuryliuk, O. Korotchenkov] // *Physica E.* – 2017. – 88 (1). – C.228 - 234.
8. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon / [F. Stillinger, T. Weber] // *Phys. Rev. B* – 1985. – 31(8). – C.5262-5271.
9. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems / [J. Tersoff] // *Phys. Rev. B* – 1988. – 37(12). – C.6991-7000.
10. Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3°K to the Melting Point / [C. Glassbrenner, G. Slack] // *Phys. Rev.* – 1964. – 134 (4A). – C.A1058-A1069.

References

1. CHANG, H.-T., WANG, C.-C., HSU J.-C. et al. (2013) High quality multifold Ge/Si/Ge composite quantum dots for thermoelectric materials. *Appl.Phys.Lett.* 102 (10). p.101902-1 - 101902-5.
2. PICHANUSAKORN, P. & BANDARU, P. (2010) Nanostructured thermoelectrics. *Mat.Sci.Eng.* R67 (2-4). p.19 - 63.
3. PERNOT, G., STOFFEL, M., SAVIC, I., et al (2010) Precise control of thermal conductivity at the nanoscale through individual phonon-scattering barriers. *Nature Materials.* 9 (6). p.491 - 495.
4. SHAHRAKI, M. & ZEINALI, Z. (2015) Effects of vacancy defects and axial strain on thermal conductivity of silicon nanowires: A reverse nonequilibrium molecular dynamics simulation. *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* 85 (1). p.233 - 238.
5. YANG, Z., FENG, R., SU, F., et al. (2014) Isotope and strain effects on thermal conductivity of silicon thin film. *Physica E.* 64 (4). p.204 - 210.
6. KUANG, Y., LINDSAY, L., SHI, Q., ZHENG G. (2016) Tensile strains give rise to strong size effects for thermal conductivities of silicene, germanene and stanene. *Nanoscale.* 8 (1). p.3760 - 3767.
7. KURYLIUK, V. & KOROTCHENKOV, O. (2017) Atomistic simulation of the thermal conductivity in amorphous SiO₂ matrix/Ge nanocrystal composites. *Physica E.* 88 (1). p.228 - 234.
8. STILLINGER, F. & WEBER, T. (1985) Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // *Phys. Rev.B.* 31 (8). p.5262-5271.
9. TERSOFF, J. (1988) New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. // *Phys. Rev.B.* 37 (12). p.6991-7000.
10. GLASSBRENNER, C. & SLACK, G. (1964) Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3°K to the Melting Point // *Phys. Rev.* 134 (4A). p.A1058-A1069.

Надійшла до редколегії 01.07.17

УДК 535.333

Мельниченко Л. Ю., к.ф.-м.н., с.н.с.,
Поперенко Л. В., д.ф.-м.н., проф.,
Юргелевич І. В., к.ф.-м.н., с.н.с.

Оптическая анизотропия наноструктурированного кремния

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська, 64/13,
e-mail: lmeln@ukr.net,
plv@univ.kiev.ua,
vladira_19@ukr.net

L. Yu. Melnichenko, PhD, Sen. Res.,
L. V. Poperenko, Dr. Sci., Prof.,
I. V. Yurglevych, PhD, Sen. Res.

Optical anisotropy of nanostructured silicon

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st., 64/13,
e-mail: lmeln@ukr.net,
plv@univ.kiev.ua,
vladira_19@ukr.net

Проведено еліпсометричну діагностику наноструктуризованого кремнію, сформованого у вигляді окремих комірок на поверхні пластини монокристалічного кремнію за допомогою методу лазерної абляції. Лазерне опромінення проводилось волоконним лазером на основі Yb, що генерує імпульси з енергією до 1 мДж на частоті 1 МГц з довжиною хвилі 1060 нм. Потужність лазерного опромінення на поверхні монокристалічного кремнію коливалася від 100 мВт до 1 Вт. Для характеристики оптичної анизотропії сформованих поверхневих структур визначено еліпсометричні параметри $\cos \Delta$ та $\operatorname{tg} \Psi$ у 2-х взаємно перпендикулярних азимутальних напрямках у власній площині зразка відносно його p -напрямку. Виявлену значну відмінність у значеннях еліпсометричних параметрів як при багатокутових вимірюваннях, так і при вимірюванні при одному куті падіння світла, пояснено розподілом напруг в скін-шарі, зондованому поляризованим світлом.

Ключові слова: наноструктурований кремній, лазерна абляція, еліпсометрія, оптична анизотропія.

Silicon nanostructures are perspective material in plasmonics, plasmonic nanolithography, photon detection and nanophotonics. The samples of the nanostructured silicon as isolated cells were formed on the single-crystal silicon wafers by a method of the laser ablation. The laser source was a home-built Yb-doped fibre laser, operating at a central wavelength of 1060 nm and generating pulses with up to 1 mJ energy at 1 MHz, which can be compressed to 100 fs. The powers incident on the samples ranged from 100 mW to 1 W. The pulse-to-pulse power stability was on the order of 0.05% (measured from 3 Hz to 250 kHz). Laser beam scanning modes provide the synthesis of nanostructured silicon dioxide particles or silicon nanoparticles. The ellipsometric parameters of the samples such as a $\cos \Delta$ and $\operatorname{tg} \Psi$ were measured by a laser ellipsometer ЛЕФ-3М-1 with $\lambda = 632.8$ nm for two mutually perpendicular directions in own plane of the sample for characterization of optical anisotropy of nanostructured silicon. The angular dependencies of ellipsometric parameters $\cos \Delta$ and $\operatorname{tg} \Psi$ of nanostructured silicon were analyzed and the principal angle of incidence ($\cos \Delta = 0$) and minimal value of the $\operatorname{tg} \Psi$ are obtained from these dependences. It is found that the difference between the significance of the principal angle of incidence and $\operatorname{tg} \Psi$ for two these directions is essential and equal to about 9° and more than 15° respectively. The essential difference between the values of the $\cos \Delta$ and $\operatorname{tg} \Psi$ for two mutually perpendicular directions in own plane of the sample when measured at one angle of incidence $\varphi = 53^\circ$ was observed too. This means that the formed silicon nanostructures possess great optical anisotropy as a result of deformation influence and appearance of elastic stresses on the surface of the nanostructured silicon.

Key words: nanostructured silicon, laser ablation, ellipsometry, optical anisotropy.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М.В.

Вступ

Кремній набув широкого застосування в мікро- і наноелектроніці, сенсорній технології, біомедицині й т.п. завдяки своїм термодинамічним, фізико-хімічним і напівпровідниковим властивостям. Інтерес до нанокompозитних і наноструктурованих структур на основі кремнію обумовлений перспективністю їх застосування при створенні пристроїв кремнієвої фотоніки [1] і пристроїв енергонезалежної пам'яті [2].

Багатообіцяючим методом одержання наночастинок різних матеріалів є лазерна абляція [3]. Передбачається, що процеси ежекції (абляції) є чисто тепловими (теплова десорбція, плавлення, перегрів, вибухове скипання) і залежать, насамперед, від величини щільності енергії імпульсу, що поглинається у поверхневому шарі мішені. Зокрема, перехід від десорбції до абляції й кількість ежектованого матеріалу повністю визначаються енергією випромінювання, початковою температурою мішені й коефіцієнтом поглинання [4].

Однією з характерних рис абляції при використанні потужних імпульсів лазерного випромінювання є формування різного роду часток (кластерів, крапель або твердих фрагментів). Можливість передбачати й контролювати ежекцію часток і склад хмари продуктів абляції є важливою умовою оптимізації параметрів процесів в багатьох практичних додатках. Найбільш широко в останні роки лазерна абляція використовується при одержанні нанокompозитних матеріалів для електронної техніки.

У представлений роботі наведені результати еліпсометричних досліджень оптичних властивостей наноструктурованого кремнію, отриманого в результаті опромінення волоконним лазером монокристалічної кремнієвої пластини.

Технологія виготовлення наноструктурованого кремнію та методика експерименту

Наноструктурований кремній формувалася на поверхні пластин монокристалічного кремнію (100) орієнтації із природним шаром оксиду методом лазерної абляції [3]. Опромінення проводилося у повітряній атмосфері.

Формування наноструктурованого кремнію відбувалося волоконним лазером на основі Yb, що генерує імпульси з енергією до 1 мДж на частоті 1 МГц з довжиною хвилі 1060 нм. Потужність лазерного опромінення на поверхні

монокристалічного кремнію коливалася від 100 мВт до 1 Вт. Режими сканування лазерного променя забезпечують синтез наноструктурованих частинок діоксиду кремнію або кремнієвих наночастинок. На поверхні кремнієвих пластин були створені наноструктуровані шари у вигляді окремих комірок. Зразки виготовлено в лабораторії Билкент університету (Анкара, Турція) [3].

На рис.1 схематично зображено комірчасту структуру у вигляді прямокутників на поверхні зразка кремнію.

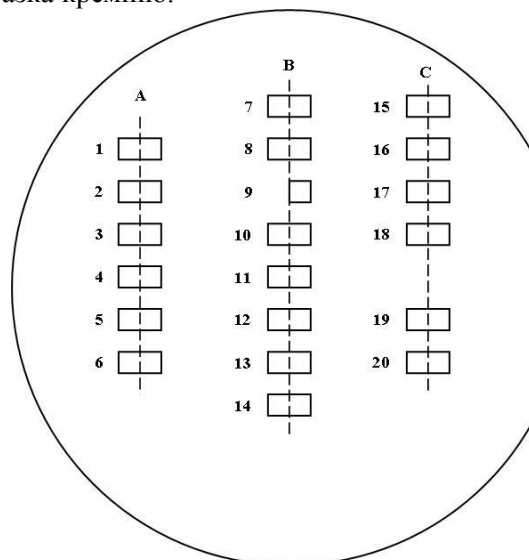


Рис. 1 Схематичне зображення комірчастої структури у вигляді прямокутників на поверхні зразка кремнію.

Окремі комірки пронумеровано від 1 до 20, а їхнє розміщення на поверхні зразка позначено трьома рядами з орієнтацією вздовж пунктирних прямих А, В та С. Еліпсометричній діагностиці підлягали ті чи інші комірки, для яких введено певне позначення, а саме зазначено, яким є вибраний ряд із А, В чи С, а також номер комірки у відповідному рядку.

Досліджувані комірки 1-8 та 10-20 мали розміри 15x7 мм², на поверхні яких візуально спостерігалась сформована дією лазера з надкороткими імпульсами поверхнева структура, окрім комірки під номером 9 на рис.1 з розмірами 7x7 мм².

Поляризаційні оптичні вимірювання проводилися на багатокуттовому еліпсометрі ЛЕФ-3М-1 на довжині хвилі $\lambda = 632,8$ нм [5].

Результати та обговорення

Визначення еліпсометричних параметрів $\cos\Delta$ та $\text{tg}\Psi$ в залежності від кута падіння світла на зразок ϕ проведено для комірки В10. На

рис. 2, а і б представлено залежності цих двох параметрів для комірки В10 зразка кремнію, виміряні за умови, коли напрямок В був перпендикулярним до площини зразка, тобто довга сторона прямокутника В10 знаходилася в р-площині (криві 1), або збігався з нею (криві 2), де, навпаки, менша сторона прямокутника В10 лежала в р-площині.

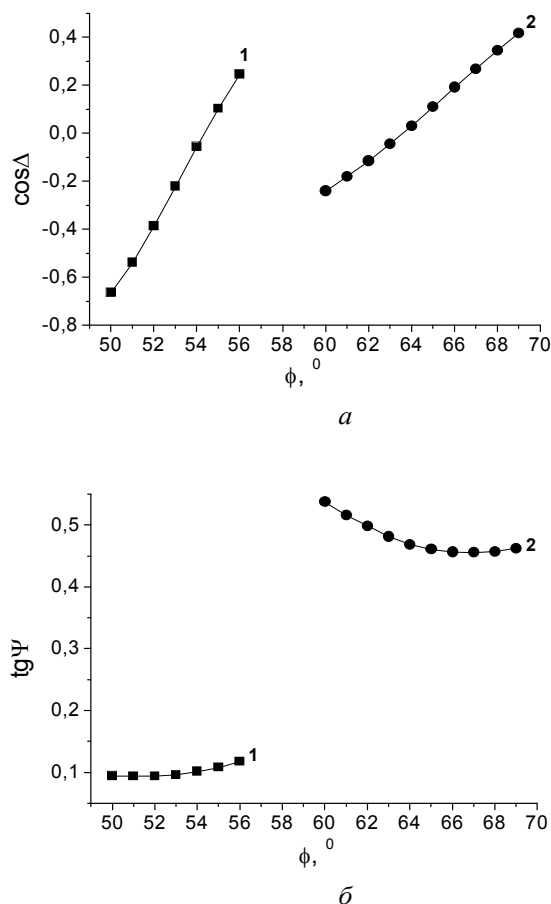


Рис. 2. Залежності $\cos\Delta(\varphi)$ (а) та $\operatorname{tg}\Psi(\varphi)$ (б) для комірки В10 (1 – паралельно довгій стороні комірки ($\alpha = 90^\circ$), 2 – перпендикулярно до неї ($\alpha = 0^\circ$)).

Видно, що ці залежності $\cos\Delta(\varphi)$ та $\operatorname{tg}\Psi(\varphi)$ суттєво відрізняються для обох орієнтацій комірки по відношенню до р-площини. Головний кут (за умови $\cos\Delta = 0$) при цьому змінюється майже на 9° , а кутове положення мінімального значення $\operatorname{tg}\Psi_{\min}$ змінюється більш ніж на 15° . Це означає, що діагностована комірка В10 через утворену в ній поверхневу структуру після дії потужного лазера проявляє оптичну анізотропію, мірою якої можуть бути обидві різниці в кутових положеннях головних кутів і мінімальних значень $\operatorname{tg}\Psi_{\min}$ для зазначених орієнтацій комірки $\alpha = 0^\circ$ (мала сторона прямокутника розміщена вздовж р-площини) та $\alpha = 90^\circ$ (довга

сторона прямокутника В10 розміщена вздовж р-площини) у власній площині зразка кремнію.

В таблиці 1 представлено значення еліпсометричних параметрів $\cos\Delta$ та $\operatorname{tg}\Psi$ для різних прямокутних комірок (рис. 1) на поверхні зразка кремнію при куті падіння $\varphi = 53^\circ$ для $\alpha = 0^\circ$ та $\alpha = 90^\circ$.

Таблиця 1
Значення еліпсометричних параметрів $\cos\Delta$ та $\operatorname{tg}\Psi$ для прямокутних комірок на поверхні зразка кремнію для $\varphi = 53^\circ$ при $\alpha = 0^\circ$ та $\alpha = 90^\circ$

№	напрямок	$\cos\Delta$	$\operatorname{tg}\Psi$
A2	$\alpha = 90^\circ$	-0,1338	0,0944
	$\alpha = 0^\circ$	-0,4813	0,8721
A3	$\alpha = 90^\circ$	-0,1680	0,0917
	$\alpha = 0^\circ$	-0,4675	0,8408
A5	$\alpha = 90^\circ$	-0,2448	0,1198
	$\alpha = 0^\circ$	-0,5803	0,9601
B8	$\alpha = 90^\circ$	-0,2349	0,0948
	$\alpha = 0^\circ$	-0,5240	0,8366
B9	$\alpha = 90^\circ$	-0,9804	0,0838
	$\alpha = 0^\circ$	0,1469	0,6132
B10	$\alpha = 90^\circ$	-0,2037	0,0960
	$\alpha = 0^\circ$	-0,5048	0,8468
B11	$\alpha = 90^\circ$	-0,2301	0,0986
	$\alpha = 0^\circ$	-0,5218	0,9094
B12	$\alpha = 90^\circ$	-0,2148	0,0979
	$\alpha = 0^\circ$	-0,5103	0,9182
C17	$\alpha = 90^\circ$	-0,1740	0,0973
	$\alpha = 0^\circ$	-0,5235	0,8632
C18	$\alpha = 90^\circ$	-0,2094	0,1111
	$\alpha = 0^\circ$	-0,5686	0,8790

З цієї таблиці видно, що для кожної з комірок в трьох зазначених рядах А, В і С завжди значення $\operatorname{tg}\Psi$ майже на порядок більше тих, що фіксуються при $\alpha = 0^\circ$ (навпаки, менша сторона прямокутника розміщена вздовж р-площини зразка).

При цьому для майже всіх комірок зміна значення $\cos\Delta$ при $\alpha = 0^\circ$ та $\alpha = 90^\circ$ підлягає тій же закономірності, а саме: за абсолютним значенням ця величина в 3.5-4 рази більша при $\alpha = 0^\circ$, ніж при $\alpha = 90^\circ$. Певне відхилення спостерігається лише для комірки В9, що, в першу чергу, пов'язано з зондуванням меншої наполовину за площею комірки, підданої обробці лазером. До того ж візуально на її поверхні не спостерігається хвиляста структура у вигляді гребнів вздовж короткої сторони прямокутної комірки ($\alpha = 0^\circ$), яка чітко помітна на всіх інших комірках. Зазначеними табличними даними підтверджується, по-перше, висока однорідність

оптичних властивостей сформованих лазерною дією ділянки на поверхні кремнію, а по-друге, що ці властивості є анізотропними для кожної із комірок, бо значення $\cos\Delta$ та $\text{tg}\Psi$ в двох взаємно перпендикулярних напрямках орієнтації зразка суттєво відрізняються. З одного боку, із загальних симетрійних міркувань такий результат міг би бути просто пояснений тим, що комірки не є квадратними на поверхні кремнію, який за діелектричною проникністю та її об'ємними властивостями тоді є ізотропним, а з іншого, - більш прискіпливого, - такого «структурного» фактору недостатньо для інтерпретації отриманих даних.

Наш дослід, як і попередній з аморфними металевими сплавами, оптичні властивості скін-шару яких проявляють анізотропію [6], вказує на результат дії деформацій і виникнення пружних напруг на поверхні зразка кремнію в межах підданих лазерній обробці областей.

Саме розподіл напруг в скін-шарі, зондованому поляризованим світлом, впливає на зміни в атомно-електронній будові такого шару, а варіації у його відгуку на збудження світлом і реєструються еліпсометричною діагностикою у

2-х взаємно перпендикулярних азимутальних напрямках.

Висновки

Таким чином, еліпсометричний метод є чутливим до виявлення оптичної анізотропії поверхневої структури нанокристалічного кремнію, сформованого у результаті лазерної обробки. Встановлено, що еліпсометричні параметри, отримані у 2-х взаємно перпендикулярних азимутальних напрямках у власній площині зразка відносно його р-напрямку, значно відрізняються як у випадку багатокуткових вимірювань (зокрема, головний кут – майже на 9° , а кутове положення мінімального значення $\text{tg}\Psi_{\min}$ – більш ніж на 15°), так і при вимірюванні $\cos\Delta$ та $\text{tg}\Psi$ при одному куті падіння світла на зразок. Отже, така поведінка оптичних властивостей є наслідком дії деформацій і сформованих пружних напруг на поверхні зразка кремнію в межах підданих лазерній обробці областей.

Список використаних джерел

1. Fernandez B. Garrido. Influence of average size and interface passivation on the spectral emission of Si nanocrystals embedded in SiO₂ / Fernandez B. Garrido, López M., Garcia C. [et al.] // Journal of Applied Physics. – 2002. – Vol. 91. – P. 798-807.
2. Tiwari S. Volatile and nonvolatile memories in silicon with nano-crystal storage / Tiwari S., Rana F., Chan K. [et al.] // IEEE Int. Electron Devices Meeting Tech. Dig. – 1995. – P. 521 – 524.
3. Öktem Bülent. Nonlinear laser lithography for indefinitely large-area nanostructuring with femtosecond pulses / Öktem Bülent, Pavlov Ihor, Ilday Serim [et al.] // Nature Photonics – 2013. – Vol. 7. – P. 897–901.
4. Zhigilei L.V. Computer simulations of laser ablation of molecular substrates / Zhigilei L.V., Leveugle E., Garrison B.J. [et al.] // Chemical Reviews. – 2003. – Vol. 103, No 2. – P. 321–347.
5. Azzam R.M.A. Ellipsometry and Polarized Light / Azzam R.M.A. and Bashara N.M. – Amsterdam: Elsevier Science Ltd, 1987. – 558 p.
6. Поперенко Л.В. Оптика металевих структур / Поперенко Л.В., Кудрявцев Ю.В., Стащук В.С., Лі Янг Пак. – Київ: ВПЦ "Київський Університет", 2013. – 531 с.

References

1. FERNANDEZ, B. GARRIDO et al. (2002) Influence of average size and interface passivation on the spectral emission of Si nanocrystals embedded in SiO₂. *Journal of Applied Physics*. 91. p. 798-807.
2. TIWARI, S. et al. (1995) Volatile and nonvolatile memories in silicon with nano-crystal storage. *IEEE Int. Electron Devices Meeting Tech. Dig.* p. 521 – 524.
3. ÖKTEM, BÜLENT et al. (2013) Nonlinear laser lithography for indefinitely large-area nanostructuring with femtosecond pulses. *Nature Photonics*. 7. p. 897–901.
4. ZHIGILEI, L.V. et al. (2003) Computer simulations of laser ablation of molecular substrates. *Chemical Reviews*. 103. p. 321–347.
5. AZZAM, R.M.A. AND BASHARA, N.M. (1987) *Ellipsometry and Polarized Light*. Amsterdam: Elsevier Science Ltd.
6. POPERENKO, L.V. et al. (2013) *Optics of metal structures*. Kyiv: Vydavnycho-polihrafichnyj centr "Kyivskyj universytet".

Надійшла до редколегії 02.02.17

УДК 616.073,756.8

Мотолига О.В.¹, асп.,
Сенчуров С.П.², к.ф.-м.н.

Впровадження режиму цифрового томосинтезу з використанням обладнання цифрової рентгенографії

¹Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська, 64/13,
e-mail: oleksandr.motolyha@gmail.com
e-mail: ² sergsenc@gmail.com

O.V.Motolyha¹, PhD stud.,
S.P. Senchurov² PhD.

The implementation of the digital tomosynthesis mode into the radiological table modality

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska str., 64/13,
e-mail: oleksandr.motolyha@gmail.com
e-mail: ² sergsenc@gmail.com

В роботі сформульовані основні принципи цифрового томосинтезу з використанням існуючого обладнання для цифрової рентгенографії. Показано високу діагностичну цінність отриманих зрізів в порівнянні з класичною рентгенографією, та низьке дозове навантаження в порівнянні з комп'ютерною томографією. Запропонований підхід перевірено на тестовій установці.

Ключові слова – Комп'ютерна томографія, томосинтез, алгоритми реконструкції.

Tomosynthesis is a new diagnostic method that combines advantages of computed tomography and X-Ray projection radiography. Tomosynthesis provide a series of slices with small radiation dose. Basic principles of digital tomosynthesis mode implementation in the radiographic table are formulated in this paper. The possibility of tomosynthesis realization according to the principles is experimentally shown with prototype X-ray unit. Patient radiation dose was significantly less than in computed tomography. To optimize patient radiation dose next steps were suggested:

- *downsample X-Ray projection images;*
- *use sensitive CsI X-Ray detectors;*
- *digital pre- and postprocessing of X-Ray projections and tomography slices;*
- *optimize X-Ray exposition according to scanning angle.*

Suggested steps helps to reduce patient radiation dose in more than 60 times compared to non-optimized tomosynthesis. Software for tomosynthesis slices reconstruction, pre- and postprocessing was developed. High diagnostic value was shown with the experimental phantom that simulates human chest.

Keywords—Computed tomography, X-ray tomosynthesis, Filtered backprojection, Reconstruction algorithms, Biomedical imaging

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Перевищення дозового навантаження на пацієнта при комп'ютерній томографії (КТ) є широко відомою проблемою [1]. Наприклад середнє дозове навантаження на пацієнта в США при КТ протягом 1996-2010 складало близько 2,3мЗв. Одним із способів зменшення дозового навантаження є цифровий томосинтез.

Томосинтез є методом тривимірної реконструкції внутрішньої структури об'єкту за неповним набором проекцій [2]. Неповнота набору проекцій накладає обмеження на якість реконструйованих даних в порівнянні з КТ. Просторова роздільна здатність при КТ майже однакова в усіх напрямках, тоді як при томосинтезі вона неоднорідна, висока в

напрямках паралельних площині детектору та низька перпендикулярно до детектора [3]. У наших попередніх дослідженнях [4] було показано доцільність реалізації цифрового томосинтезу з використанням існуючого обладнання для цифрової ламінографії. Ключовим питанням була наявність цифрового детектора рентгенівського випромінювання здатного достатньо швидко зчитувати.

Ціллю цієї роботи є вивчити можливості та визначити технічні вимоги для впровадження цифрового томосинтезу з використанням існуючого обладнання для цифрової ламінографії.

Зниження дозового навантаження є важливою задачею в комп'ютерній томографії. В

нашій роботі ми будемо намагатись досягти дозового навантаження на пацієнта на рівні еквівалентному одному звичайному рентгенівському знімку.

Щоб досягти цієї цілі нам потрібно розв'язати ряд практичних задач:

- Створити цифровий детектор рентгенівського випромінювання з підвищеною чутливістю та можливістю отримувати серії рентгенівських знімків;
- Використати цифрові методи обробки знімків та цифрові методи пост-обробки зрізів у томосинтезі для зниження дозового навантаження.

Установка для лінійної томографії та цифрового томосинтезу

Стандартний вигляд установки для лінійної томографії та цифрового томосинтезу показано на рис. 1. Ця установка розроблена для роботи у трьох режимах.

В першому режимі установка дозволяє отримувати одиничні рентгенівські знімки пацієнта.

У другому режимі детектор та джерело рентгенівського випромінювання рухаються лінійно у протилежних напрямках. Зріз що містить їх спільну вісь обертання називається центральним. Висота осі обертання відносно пацієнта обирається нарівні області що необхідно дослідити в тілі. Час експозиції рентгенівського знімку відповідає повному часу руху системи джерело-детектор. Таким чином отримується зріз лінійної томографії. Він містить контрастні контури об'єктів в центральному зрізі та розмите зображення об'єктів нижче та вище від центрального зрізу.

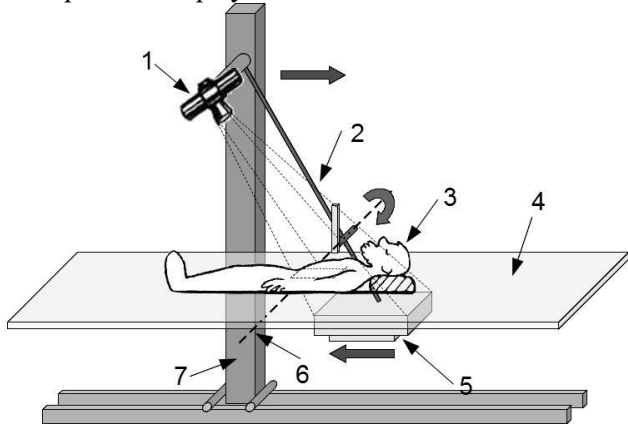


Рис. 1. Схема установки для томосинтезу. Джерело рентгенівського випромінювання (1), вісь що синхронізує рух детектора та джерела (2), пацієнт (3), стіл (4), цифровий детектор рентгенівського випромінювання (5), вісь обертання системи (6), рухома опора (7).



Рис. 2. Експериментальна установка для томосинтезу.. Джерело рентгенівського випромінювання (1), вісь що синхронізує рух детектора та джерела (2), фантом (3), стіл (4), цифровий детектор рентгенівського випромінювання (5), вісь обертання системи (6), рухома опора (7).

В третьому режимі рух цифрового детектора та джерела такий самий як у другому, проте зображення, отримані під різними кутами зберігаються окремо. В результаті ми маємо серію знімків, зазвичай 60-90. Цей набір проєкцій використовується для цифрової реконструкції внутрішньої структури об'єкту дослідження.

Експериментальні виміри на тестовій установці.

Тестова установка, що працює в режимі томосинтезу була виготовлена спільно з НВО Телеотик (рис. 2). Виготовлена установка відрізнялась від зображеної на Рис. 1 тим що в ній джерело рентгенівського випромінювання залишалось нерухомим, тоді як детектор та стіл з дослідженим об'єктом рухались. Проте, якщо перейти в систему координат об'єкту, то геометрія руху джерела та детектора співпадала зі схемою на рис. 1. Експериментальна установка дозволяла отримати серію знімків в діапазоні кутів від -32° ... $+32^{\circ}$ з дискретизацією по куту в 1° .

Реконструкція внутрішньої структури об'єкту виконувалась пошуком наближеного

чисельного розв'язку рівняння:

$$I_{nij} = \frac{I_0}{R_{nij}^2} \cos(\alpha_{nij}) \exp\left(-\int \mu(s) ds\right) \quad (1)$$

Де n – номер проекції, i, j – координати пікселя на проекції, I_{nij} – інтенсивність рентгенівського випромінювання що попало на детектор. I_0 – початкова інтенсивність рентгенівського випромінювання, $\mu(s)$ – просторовий розподіл коефіцієнта поглинання рентгенівського випромінювання вздовж променю. R_{nij} – відстань від джерела до детектора, α_{nij} – кут нахилу променю що падає на детектор. Інтегрування відбувається вздовж променю що падає на знімок n в точку з координатами i, j .

У рівнянні 1 використовуються наступні наближення:

1. Джерело рентгенівського випромінювання є монохромним;
2. Розсіювання рентгенівського випромінювання відсутнє;
3. Передаточна характеристик детектора є лінійною

Томосинтез за 64 проекціями в діапазоні кутів $-32^\circ \dots +32^\circ$ дозволяє отримати гарне зображення внутрішньої структури об'єкту. На рис. 3 показано зріз реконструйованого фантому. Роздільна здатність у площині детектора становить 2.5 пар ліній/мм та 0.2 пар ліній/мм по осі перпендикулярній детектору. Різниця в роздільній здатності викликана обмеженням набором проекцій що використовувався для реконструкції.

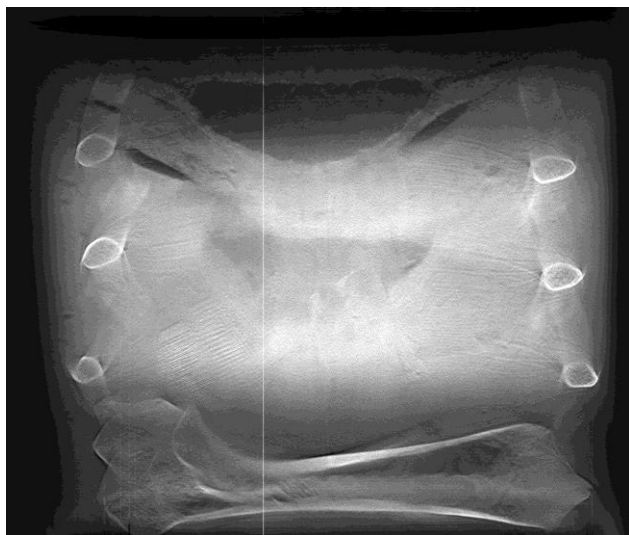


Рис. 3. Приклад зрізу грудного фантому реконструйованого за 64 проекціями.

Оптимізація дозового навантаження

Запропонований прототип установки для томосинтезу використовує 64 рентгенівські проекції, дозове навантаження перевищує навантаження при звичайному рентгенівському знімку у відповідну кількість раз. Нашою наступною метою буде зниження дозового навантаження. Щоб досягти цієї цілі нам необхідно підвищити чутливість рентгенівського детектора у 64 рази.

Існує кілька шляхів зниження дозового навантаження, і всі їх потрібно використати.

1. Зменшити роздільну здатність у 4 рази до ≈ 1.2 пар ліній/мм в цифровому томосинтезі та ≈ 2.4 пар ліній/мм у цифровій флюорографії. Для режиму томосинтезу це дозволить зменшити дозове навантаження у 16 раз (4x4) завдяки більшій площі одиничного пікселя на детекторі що реєструє рентгенівське випромінювання.

2. Використовувати більш чутливий детектор. Так використання CsI тонких детекторів дозволить більш ніж в 2 рази зменшити дозове навантаження [5].

3. Використовувати цифрову передобробку знімків та постобробку реконструйованих зрізів. Для цієї цілі може бути використано як самостійно реалізовані алгоритми так і доступне комерційне програмне забезпечення [6]. Використання цього підходу дозволяє зменшити дозове навантаження майже вдвічі [7].

4. Оптимізувати експозицію в залежності від геометрії сканування. Як було показано в (1) інтенсивність що попадає на детектор залежить від кута сканування та від відстані до детектора. Так наприклад при русі детектора та джерела вуд -32° до 0° , величина зростає у 1.5 рази. Отже якщо не коректувати експозицію це означитиме що крайні знімки будуть недоекспоновані, а центральні переекспоновані. Фактично це призведе до неефективного використання рентгенівського випромінювання та збільшенню дозового навантаження на пацієнта.

Висновки

Підсумуємо експериментально отриману про томосинтез інформацію:

1. зменшення дозового навантаження при цифровому томосинтезі, можливо досягти рівню одиничного рентгенівського знімку;
2. використання цифрового детектору рентгенівського випромінювання зі зменшеною роздільною здатністю до 1.2 пар ліній/мм та цифровою пре- та постобробкою дозволяє знизити дозове навантаження 1 знімку майже у 64 рази в порівнянні з дозовим навантаженням

при звичайному рентгенографічному знімку з роздільною здатністю 4.6 пар ліній/мм;

3. експозиція повинна бути підібрана відповідно до кута сканування щоб отримати знімки однакової якості під різними кутами, та ефективно використовувати рентгенівське випромінювання;

Список використаних джерел

1. Smith-Bindman R. Use of diagnostic imaging studies and associated radiation exposure for patients enrolled in large integrated health care systems, 1996-2010 / Smith-Bindman R., Migliorette D., Johnson E. // JAMA. - 2012.- V. 307, №. 22. - С. 2400–2409. Режим доступу до журн.: <http://dx.doi.org/10.1001/jama.2012.5960> .

2. Dobbins J. T III Digital x-ray tomosynthesis: current state of the art and clinical potential/ J. T Dobbins III, D. J. Godfrey // Physics in Medicine and Biology. - 2003.- V. 48, №. 19. – P. R. 65. - Режим доступу до журн.: <http://stacks.iop.org/0031-9155/48/i=19/a=R01> .

3. Flynn M. J. Spatial resolution of x-ray tomosynthesis in relation to computed tomography for coronal/sagittal images of the knee: Proc. SPIE 6510, Medical Imaging 2007: Physics of Medical Imaging, 65100D / Flynn M. J., McGee R., Blechinger J. – 2007. – Режим доступу: <http://dx.doi.org/10.1117/12.713805> .

4. The enhancement of the linear x-ray tomography with digital tomosynthesis algorithms : Proc. Electronics and Nanotechnology (ELNANO), 2013 IEEE XXXIII International Scientific Conference / О. Мотолига, С. Сенчуров. –, 2013. – С. 319–321.

5. Efficiency and pattern noise suppression in sensor array x-ray digital receptors : Proc. Electronics and Nanotechnology (ELNANO) 2013 IEEE XXXIII International Scientific Conference / С. Мірошніченко, А. Невгасимий. – 2013. – С. 328–331.

6. ContextVision. – Режим доступу: <http://www.contextvision.com/modalities/digital-x-ray> .

7. The possibilities of the contrast improvement in fluorography image with digital processing. : Proc. Electronics and Nanotechnology (ELNANO) 2013 IEEE XXXIII International Scientific Conference / Асламова Л., Н. Меленевська, Мірошніченко Н., Грабовська Е., Мірошніченко С., Радько Д. – 2013. – С. 325–327.

4. експерименти виконані на тестовому обладнанні показали ефективність запропонованого методу томосинтезу для медичної діагностики;

References

1. SMITH-BINDMAN, R., MIGLIORETTI, D. and JOHNSON, E. (2012) Use of diagnostic imaging studies and associated radiation exposure for patients enrolled in large integrated health care systems, 1996-2010. *JAMA*, vol. 307, no. 22, pp. 2400–2409, [Online]. Available from: <http://dx.doi.org/10.1001/jama.2012.5960> .

2. J. T. D. III and GODFREY, D. (2003) Digital x-ray tomosynthesis: current state of the art and clinical potential. *Physics in Medicine and Biology*, vol. 48, no. 19, p. R65, [Online]. Available from: <http://stacks.iop.org/0031-9155/48/i=19/a=R01>.

3. FLYNN, M., MCGEE, R. and BLECHINGER, J., (2007) *Spatial resolution of x-ray tomosynthesis in relation to computed tomography for coronal/sagittal images of the knee* pp. 65 [Online]. Available from: <http://dx.doi.org/10.1117/12.713805>.

4. SENCHUROV, S. and MOTOLYGA, O. (2013) The enhancement of the linear x-ray tomography with digital tomosynthesis algorithms. *Electronics and Nanotechnology (ELNANO), 2013 IEEE XXXIII International Scientific Conference*, pp. 319–321.

5. MIROSHNYCHENKO, S. and NEVGASIMY, A. (2013) Efficiency and pattern noise suppression in sensor array x-ray digital receptors. *Electronics and Nanotechnology (ELNANO), 2013 IEEE XXXIII International Scientific Conference*, pp. 328–331.

6. ContextVision. (2017) [Online]. Available from: <http://www.contextvision.com/modalities/digital-x-ray/>.

7. ASLAMOVA, L et al. (2013) The possibilities of the contrast improvement in fluorography image with digital processing in *Electronics and Nanotechnology (ELNANO), 2013 IEEE XXXIII International Scientific Conference*, pp. 325–327.

Надійшла до редколегії 06.03.17.

УДК 535.324, 539.2

Нагорна Т.В.¹, асп.,
Свечнікова О.С.¹, к.ф.-м.н.,
Худоба Д.², к.ф.-м.н.

Дослідження непружного розсіювання нейтронів за допомогою спектрометра НЕРА

¹Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська, 64/13,
e-mail: svechnikova@univ.kiev.ua
² Університет імені Адама Міцкевича,
Познань, Польща
e-mail: dmn@amu.edu.pl

T. Nagorna¹, PhD. stud.,
O. Svechnikova¹ PhD.,
D. Chudoba², PhD.

Inelastic neutron scattering studying by NERA spectrometer

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska str., 64/13,
e-mail: svechnikova@univ.kiev.ua

² Adam Mickiewicz University,
Poznan, Poland e-mail: dmn@amu.edu.pl

Робота присвячена огляду методу непружного розсіювання нейтронів для дослідження динаміки молекул. Завдяки можливостям, реалізованим на установці НЕРА, розташованій на 7 каналі реактора ІБР-2 Об'єднаного інституту ядерних досліджень (м. Дубна), одночасно можна вимірювати спектри пружного та непружного розсіювання нейтронів, дифракційні спектри. Висока практичність установки зумовлена також функцією підтримки температурного режиму у діапазоні від температури рідкого гелію 4 К до 400 К. Зазначені параметри дають змогу проводити експерименти для отримання інформації щодо внутрішньої динаміки та структури молекул, зокрема, дослідження речовин, в яких фазові переходи супроводжуються змінами структури, динаміки решітки або характеру стохастичного руху молекул або молекулярних груп. У роботі на прикладі отриманого з експерименту спектру непружного розсіювання нейтронів викладена процедура обробки експериментальних даних для інтерпретації результатів. Наводиться короткий аналіз переваг та недоліків установки НЕРА.

Ключові слова: непружне розсіювання нейтронів, метод часу прольоту, метод нейтронної порошкової дифракції, молекулярні кристали.

The work is devoted to review of inelastic neutron scattering method to study the dynamics of molecules. To obtain information about elastic and inelastic parts of spectra, neutron diffraction simultaneously is possible due to opportunities realized on NERA spectrometer located on the 7th channel of reactor IBR-2 of Joint institute for nuclear research (Dubna). The high practicality of the spectrometer is also due to possibility of changing the temperature in the range from the temperature of liquid helium 4 K to 400 K. These parameters make it possible to do experiments for obtain information about internal dynamics and structure of molecules, particularly, investigation of substances in which phase transitions are accompanied by changes in the structure, lattice dynamics or in the character of stochastic motion of the molecules or molecular groups. The processing of experimental data for inelastic neutron scattering is demonstrated on example of calculating of experimental spectrum. A brief analysis of the advantages and deficiencies of NERA spectrometer is provided in the article.

Key Words: inelastic neutron scattering, time-of-flight method, neutron powder diffraction method, molecular crystal.

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л. А.

Вступ

Спектрометр оберненої геометрії НЕРА розташований на 7 горизонтальному каналі реактора ІБР-2 у Лабораторії нейтронної фізики

ім. І.М. Франка Об'єднаного інституту ядерних досліджень (м. Дубна). Установка є ефективним приладом для вивчення динаміки молекул, а також дифракції досліджуваних речовин [1-3].

Метод непружного розсіяння нейтронів є найбільш чутливим до коливань молекулярних комплексів, що у своєму складі мають атоми водню. Таким чином, спектрометр НЕРА є унікальним інструментом для дослідження насичених протонами біологічних речовин.

У методі оберненої геометрії на зразок падає «білий» спектр нейтронів від імпульсного джерела. Це дозволяє ефективно використовувати повний спектр нейтронів, отриманих із джерела. Після розсіяння реєструються монохроматичні нейтрони. Енергія нейтронів, які потрапили на зразок, аналізується за часом прольоту від джерела до зразка.

Спектрометр НЕРА

Спектрометр оберненої геометрії НЕРА розташований на відстані 109,05 м від сповільнювача реактору ІБР-2 (рис. 1) [4]. У залежності від використаного модератора (вода або холодний сповільнювач) імпульс швидких нейтронів сповільнюється до величини імпульсу термічних або холодних нейтронів [5].

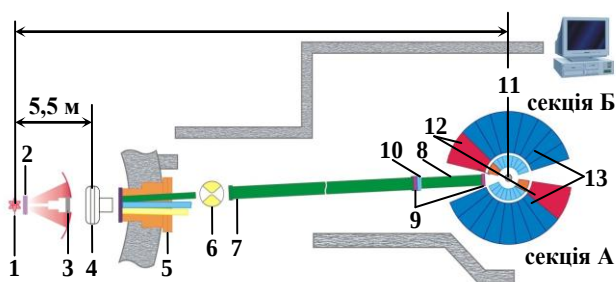


Рис. 1. Блок-схема розташування НЕРА та сповільнювача реактору ІБР-2 [4]: 1 – активна зона ІБР-2, 2 – тепловий та холодний сповільнювач, 3 – шибера пучка, 4 – чопер швидких нейтронів, 5 – вакуумний спліттер трьох нейтронних каналів, 6 – λ -чопер, 7 – вакуумний дзеркальний Ni-нейтронівід, 8 – вакуумна секція доводки пучка до зразка, 9, 10 – монітор та діафрагми падаючого пучка, 11 – зразок, 12 – секції нейтронної дифракції, 13 – секції непружного (INS) та квазіпружного розсіяння нейтронів (QNS).

Далі пучок нейтронів проходить через вікно шибера пучка (3) та чопер швидких нейтронів (4). Після чого у спліттері довжиною 16,5 м (5) 7-го каналу починаються дзеркальні нейтроніводи трьох установок: НЕРА (7), СКАТ та ЕПСІЛОН. У зв'язку з тим, що на

установках СКАТ та ЕПСІЛОН планувалось проведення експериментів із холодними нейтронами до $\lambda = 14 \text{ \AA}$ була необхідна інсталяція нового λ -чопера. Діаметр чопера швидких нейтронів складає 134 cm^2 із товщиною поглинаючого шару TiH_2 6,2 см та радіусом 48 см. Переривач розташований на відстані 26,95 см від сповільнювача та обертається із частотою 2,5 Гц.

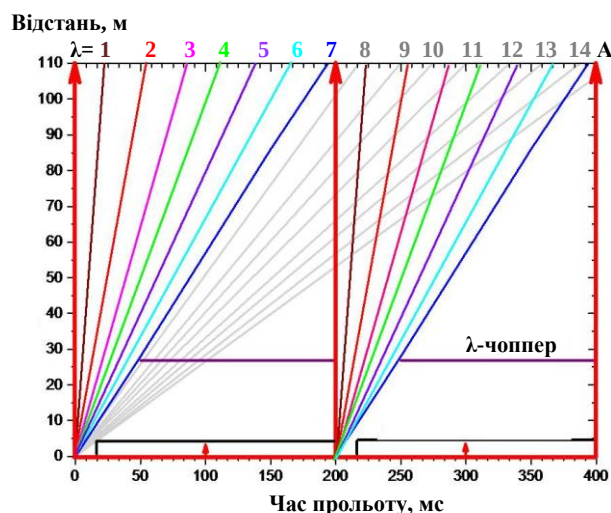


Рис. 2. Діаграма часу-прольоту λ -чопера [4].

Із діаграми часу-прольоту, представленій на рис. 2, видно, що для установки НЕРА λ -чопер дозволяє використовувати нейтрони з довжиною хвилі до $7 \text{ \AA}$.

Загальна довжина дзеркального вакуумного нейтроніводу (7) складає 80 м. Його переріз дорівнює $(5 \times 16) \text{ cm}^2$. Нейтронівід закінчується монітором та діафрагмами колімації пучка (9, 10). Останні 2 м до зразка пучок проходить по вакуумованому нейтроніводу (8).

Спектрометр НЕРА складається з двох симетричних частин (А і Б на рис. 3 а), що містять секції для вимірювання нейтронної дифракції, непружного і квазіпружного розсіяння нейтронів.

При проведенні експерименту з дифракції розсіяння на зразку (1) нейтрони проходять через коліматори (3) і детектуються двома видами детекторів: циліндричними гелієвими лічильниками (7) без додаткової колімації з високою яскравістю і прямокутними гелієвими лічильниками (8) з високим рівнем колімації, які записують спектр із низьким рівнем фону. Отримані дані реєструються для кутів $30^\circ \leq 2\theta \leq 70^\circ$ та $110^\circ \leq 2\theta \leq 150^\circ$.

Деталі камер непружного і квазіпружного розсіяння більш докладно проілюстровані на

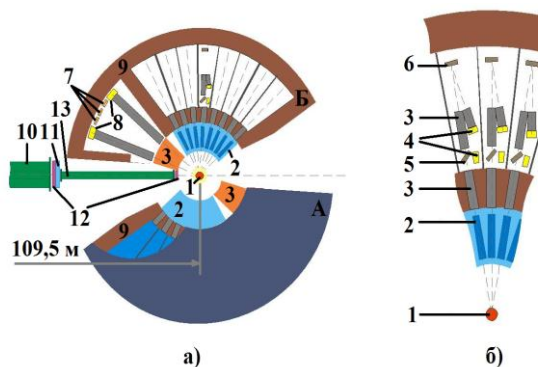


Рис. 3. Основні складові спектрометра НЕРА [4]: 1 - зразок, 2 - берилієві фільтри, 3 - коліматори, 4 - детектори He-3 (INS і QNS), 5 - PG-аналізатори (INS), 6 - монокристалічні аналізатори (QNS), 7 - детектори високоінтенсивної нейтронної дифракції, 8 - дифракційні детектори з високою роздільною здатністю, 9 - захист спектрометра, 10 - нікелевий дзеркальний нейтронвід у вакуумній трубці, 11, 12 - діафрагми та монітор падаючого пучка, 13 - вакуумний нейтронвід.

рис. 3 б. Розсіяні зразком (1) нейтрони проходять через берилієві фільтри (2), що охолоджуються рідким азотом. Після цього енергія нейтронів не перевищує 5,25 MeV. Спектри непружного та квазіпружного розсіяння реєструються для кутів від 20° до 160° із кроком 10° .

Аналіз енергії розсіяних нейтронів може здійснюватися такими трьома способами.

- Детектор (4) розташовується безпосередньо за берилієвим фільтром (2). Такий спосіб дозволяє вимірювати спектр непружного розсіяння з високою інтенсивністю, проте з низькою роздільною здатністю.

- Використовуючи берилієві фільтри і піролітичний кристал-аналізатор (PG-аналізатор), що розсіює нейтрони під кутом $2\Theta = 90^\circ$ до детектора. Такий тип можна застосовувати для вимірювань спектру непружного розсіяння із середнім значенням інтенсивності та роздільної здатності спектрометра.

- Аналіз за допомогою берилієвих фільтрів та кристала-аналізатора (Cu, Al, Zn або PG) із кутом розсіяння $2\Theta = 174^\circ$. У такому випадку інтенсивність обмежена, але через розсіяння назад роздільна здатність спектрометра значно

зростає. Цей тип підходить для досліджень квазіпружного розсіяння. Також він може використовуватись разом із способом 2.

Залежно від обраної методики аналізу енергії розсіяних нейтронів отримані спектри мають різну роздільну здатність. Із збільшенням роздільної здатності інтенсивність падаючих нейтронів помітно зменшується. Функції роздільної здатності різних компонент спектрометрів оберненої геометрії більш детально представлені у роботі [6].

Інтенсивність розсіяних нейтронів $I(t, \theta, T)$ визначається як згортка поперечного перерізу розсіяння $\sigma(E_i, E_f, \theta, T)$ та потоку падаючих нейтронів $\Phi(E_i)$ із функцією роздільної здатності спектрометра $R(E_i, E_f, t_0, t)$:

$$I(t, \theta, T) \Delta t = \Delta t \iiint \sigma(E_i, E_f, \theta, T) \Phi(E_i) \times R(E_i, E_f, t_0, t) dE_i dE_f dt_0 \quad (1)$$

де Δt – інтервал часу, який відповідає ширині каналу аналізатора, E_i і E_f – енергії падаючих та розсіяних нейтронів, відповідно.

Функцію роздільної здатності спектрометра НЕРА можна записати у вигляді:

$$R(E_i, E_f, t_0, t) = \rho(E_i, t_0) n(E_f) \delta(t - t_0 - t_1 - t_2), \quad (2)$$

де $\rho(E_i, t_0)$ – розподіл за часом падаючих нейтронів із енергією E_i , що вилетіли із джерела у момент часу t_0 , $n(E_f)$ – розподіл по енергії розсіяних нейтронів, $\delta(t - t_0 - t_1 - t_2)$ задає умову реєстрації у момент часу t нейтронів, які вилетіли із джерела, у момент часу t_0 та після розсіяння на зразку мали енергію E_f . Час $t_1 = \alpha L_1 / \sqrt{E_i}$ – час прольоту нейтронів із енергією E_i відстані L_1 (109,05 м) та $t_2 = \alpha L_2 / \sqrt{E_f}$ – час прольоту нейтронів із енергією E_f відстані від зразка до детектора L_2 (1,015 м), α – коефіцієнт відповідності швидкості та енергії нейтрона.

Відносна роздільна здатність спектрометра НЕРА для непружного розсіяння, яка була виміряна із використанням PG-аналізатора для кутів розсіяння $2\Theta = 90^\circ, 120^\circ, 174^\circ$, представлена на рис. 4.

$\Delta \omega / \omega, \%$

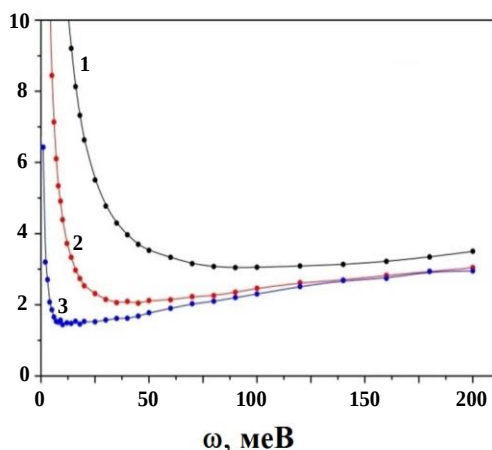


Рис. 4. Залежність відносної роздільної здатності спектрометра НЕРА від передачі енергії нейтронів для кутів 90° (1), 120° (2), 174° (3).

Роздільна здатність спектрометра у діапазоні передачі енергії від 5 меВ до 100 меВ розраховується від 2 до 3 %. Зі збільшенням передачі енергії роздільна здатність спектрометра зменшується.

Метод часу прольоту

В основі роботи спектрометра НЕРА лежить метод часу прольоту, суть якого полягає у визначенні довжини хвилі нейтрона шляхом співставлення відстані від джерела до детектора (109,5 м) та часу, за який нейтрон подолав цю відстань. Тоді довжина хвилі зареєстрованого нейтрона буде визначатися формулою [7]:

$$\lambda = h / mv = (h / mL)t, \quad (3)$$

де m – маса нейтрона, v – його швидкість, L – відстань, яку пролетів нейтрон, t – час прольоту нейтрона.

З джерела, що знаходиться на відстані L від детектора, із періодичністю t за час Δt вилітають пучки нейтронів. Нейтрони з більшою енергією потрапляють у детектор пізніше, ніж нейтрони з меншою. Таким чином, детектор реєструє інтенсивність падаючих нейтронів та їхній час прольоту. Отриманий спектр розсіяних нейтронів нормується на падаючий потік нейтронів, після чого проводиться корекція на фон.

Аналіз експериментальних даних

Обернена геометрія спектрометра НЕРА дає унікальну можливість одночасної реєстрації часово - прольотних спектрів непружного розсіяння нейтронів і спектрів дифракції нейтронів від досліджуваного зразка. Після вимірювання спектрів непружного розсіяння нейтронів за допомогою програми NuVIS здійснюється підсумовування спектрів непружного розсіяння з детекторів, які знаходяться під різними кутами. Після цього віднімається фон від тримача зразка і кріостату. Слід зазначити важливість цієї процедури, оскільки коректне віднімання фону має велике значення при інтерпретації даних. Приклад отриманого на спектрометрі НЕРА спектру, представлений на рис. 5.

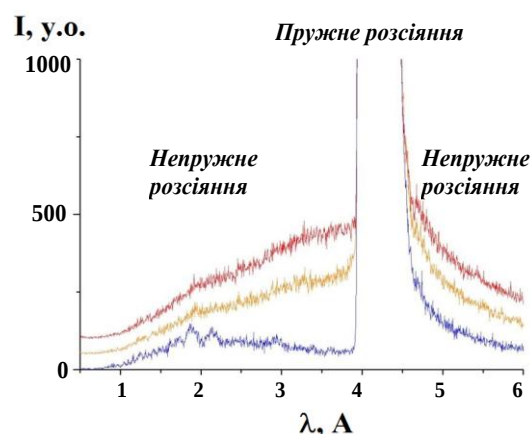


Рис. 5. Спектри непружного розсіяння нейтронів амлодипіну бесилату, отримані при різних температурах: 290 К (1), 150 К (2), 10 К (3).

У спектрі можна виділити частини, пов'язані із непружним розсіянням нейтронів (до 3,85 Å), та пружним розсіянням нейтронів (від 3,9 Å до 5 Å). Для дослідження внутрішньої динаміки молекул зразка необхідно інтерпретувати непружну частину. У наведеному прикладі вона знаходиться у межах до 3,85 Å і складається з оптичних та акустичних мод. При кімнатній температурі оптична та акустична моди відрізняються незначним чином. Однак при температурі 10 К можна бачити, що до 2,2 Å мають місце міжмолекулярні коливання (оптичні моди), а у діапазоні від 2,2 Å до 3,9 Å – міжмолекулярні коливання (акустичні моди). Можливість розрізнити дані області може свідчити про наявність впорядкування у кристалічній фазі.

Аналізуючи частину спектру, яка відповідає непружному розсіянню нейтронів, можна припустити, що при кімнатній температурі та температурі 150 К внутрішньомолекулярні (оптичні) та міжмолекулярні (акустичні) коливання не мають явного розмежування. Однак при температурі 10 К можна бачити, що міжмолекулярні коливання знаходяться у діапазоні від 2,2 Å до 3,9 Å, а внутрішньомолекулярні коливання - у межах, менших за 2,2 Å.

При подальшому представленні отриманих результатів використовується шкала переданих енергій або частот. При перетворенні тимчасової шкали в енергетичну для функції фононних станів $G(\omega)$ використовується середнє значення E_i , яке відповідає певному каналу тимчасового аналізатора. Для зручності при згортці у рівнянні (1) використовують середні величини енергетичного розподілу розсіяних нейтронів E_f , середня величина часового розподілу падаючих нейтронів t_0 та середній кут розсіяння $\varphi_0 = 90^\circ$. Після цього відновлюють узагальнені функції фононних станів $G(\omega)$ в однофононному наближенні (рис. 6).

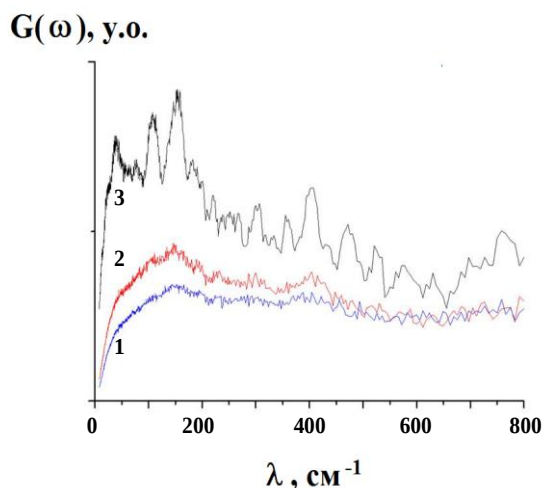


Рис. 6. Спектр густини фононних станів при температурах: 290 К (1), 150 К (2), 10 К (3).

Однофононне наближення коректне при низьких температурах, у той час як із збільшенням температури необхідно

враховувати внесок багатофононних процесів. Спектр густини фононних станів загалом представляють у шкалі хвильових чисел для зручності подальшого порівняння із іншими результатами, наприклад, ІЧ-спектроскопії або комбінованого світлорозсіяння.

Як видно з рис. 5, при температурі 10 К спектр густини станів можна умовно поділити на дві частини, які пов'язані з внутрішньомолекулярними та міжмолекулярними коливаннями. Дійсно, при передачі енергії 105 cm^{-1} і 155 cm^{-1} спостерігається два максимуми. Це свідчить про рух лише певних груп атомів, а не всієї молекули разом.

Висновки

Метод непружного розсіяння нейтронів є найбільш оптимальним способом досліджень речовин із високим вмістом водню. Спектрометр НЕРА дає можливість отримати спектри передачі низьких енергій із високою роздільною здатністю для молекулярних кристалів, що дозволяє описати динаміку коливання атомів.

Однчасне вимірювання спектрів дифракції, пружного та квазіпружного розсіяння нейтронів із можливістю варіювати роздільну здатність спектрометра дає унікальну нагоду для спостереження динаміки молекул та структури досліджених зразків, що є необхідним для досліджень органічних сполук.

Тим не менш, спектрометр НЕРА на реакторі ІБР-2 на сьогодні значно поступається існуючим світовим аналогам та спланованим спектрометрам схожого типу (TOSCA на імпульсному джерелі ISIS (Великобританія) та LAGRANGE в ILL (Франція), тому для оптимізації роботи спектрометру необхідна установка нового «балістичного» нейтроноводу. У цьому випадку нейтрони захоплюються із максимально можливої поверхні сповільнювача, перенос потоку нейтронів на великі відстані здійснюється дзеркальним нейтроноводом більшого перерізу та фокусування пучка на зразку здійснюється за допомогою конусної супердзеркальної секції.

Список використаних джерел

1. Pawlukojć A. The molecular structure and dynamics of 2-aminopyridine-3-carboxylic acid by X-ray diffraction at 100 K, inelastic neutron scattering, infrared, Raman spectroscopy and from first principles calculations / A. Pawlukojć, W. Starosta, J. Leciejewicz et.al. // *Chemical Physics Letters*. – 2007. – V. 437. – P. 32-37.
2. Habrylo S. A setup for neutron studies of condensed phases under high pressure at the spectrometer of inverted geometry / S. Habrylo, S. Bragin, J. Brańkowski et.al. // *High Pressure Research*. – 1990. – V. 4. – P. 457-459.
3. Filarowski A. Inelastic neutron scattering and vibrational spectra of 2-(N-methyl- α -iminoethyl)-phenol and 2-(N-methyliminoethyl)-phenol: Experimental and theoretical approach / A. Filarowski, A. Koll, P. Lipkowski et.al. // *Journal of Molecular Structure*. – 2008. – V. 880. – P. 97-108.
4. Natkaniec I. Parameters of the NERA spectrometer for cold and thermal moderators of the IBR-2 pulsed reactor / I. Natkaniec, D. Chudoba, L. Hetmańczyk et.al. // *Journal of Physics: Conference series*. – 2014. – V.554. – P. 012002(12).
5. Ananiev V. The world's first pelletized cold neutron moderator at a neutron scattering facility / V. Ananiev, A. Belyakov, M. Bulavin et.al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*. – 2014. – V.320. – P. 70-74.
6. Bodnarchuk I. The effect of gravity on the resolution for time-of-flight specular neutron reflectivity / I. Bodnarchuk, S. Manoshin, S. Yaradaikin et.al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*. – 2011. – V.631 (1). – P. 121-124.
7. Булавін Л.А. Нейтронна діагностика рідкого стану речовини / Л.А. Булавін.- Чорнобиль: Ін-т проблем безпеки АЕС, 2012. – 532 с.

References

1. PAWLUKOJĆ, A., STAROSTA, W., LECIEJEWICZ, J. et.al. (2007). The molecular structure and dynamics of 2-aminopyridine-3-carboxylic acid by X-ray diffraction at 100 K, inelastic neutron scattering, infrared, Raman spectroscopy and from first principles calculations *Chemical Physics Letters*. 437, p. 32-37.
2. HABRYLO, S., BRAGIN, S., BRAŃKOWSKI, J. et.al. (1990). A setup for neutron studies of condensed phases under high pressure at the spectrometer of inverted geometry *High Pressure Research*. 4, p. 457-459.
3. FILAROWSKI, A., KOLL, A., LIPKOWSKI, P. et.al. (2008). Inelastic neutron scattering and vibrational spectra of 2-(N-methyl- α -iminoethyl)-phenol and 2-(N-methyliminoethyl)-phenol: Experimental and theoretical approach *Journal of Molecular Structure*. 880, p. 97-108.
4. NATKANIEC, I., CHUDOBA, D., HETMAŃCZYK, L. et.al (2014). Parameters of the NERA spectrometer for cold and thermal moderators of the IBR-2 pulsed reactor *Journal of Physics: Conference Series*. 554, 012002 (12 p).
5. ANANIEV, V., BELYAKOV, A., BULAVIN, M. et.al. (2014). The world's first pelletized cold neutron moderator at a neutron scattering facility *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*. 320, p. 70-74.
6. BODNARCHUK, I., MANOSHIN, S., YARADAIKIN, S. et.al (2011). The effect of gravity on the resolution for time-of-flight specular neutron reflectivity *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*. 631 (1), p. 121-124.
7. BULAVIN, L. (2012) *Neutron diagnostics liquid state of matter*. Chernobyl: Institute for Security AES.

Надійшла до редколегії 27.06.17

УДК 536.413.2

Ніколаєнко А.В.¹, інж.,
Гололобов Ю.П.², д.ф.-м.н., проф.,
Боровий М.О.¹, д.ф.-м.н., доц.

Рентгенівська дилатометрія *C* та *2C* політипів сегнетоелектрика TlInS_2 в діапазоні температур 180 К - 300 К

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,

²Національний транспортний університет, 01010, м.Київ, вул. Суворова 1
e-mail: alina.salnik@gmail.com

A.V. Nikolaenko¹, Eng.,
Yu. P. Gololobov², Dr. Sci., Prof.,
M.O. Borovoy¹, Dr. Sci., Assoc. Prof.,

The X-Ray dilatometry of *C* та *2C* polytypes of TlInS_2 ferroelectrics in temperature range 180 K - 300 K

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,

²National Transport University, 01010, Kyiv, Suvorova Street 1
e-mail:¹ alina.salnik@gmail.com

Методом рентгенівської дилатометрії експериментально досліджено температурні залежності параметрів a , b , c елементарної комірки C та $2C$ політипів кристалів TlInS_2 в області температур 180 К – 300 К. Виявлено, що температурні залежності параметрів a , b , c для таких політипів демонструють суттєві відмінності. У зразках C -політипу параметр a в області 226 К – 300 К характеризується додатнім лінійним коефіцієнтом теплового розширення (α_a), в інтервалі 214 К – 226 К параметр a залишається сталим, тоді як при $T < 214$ К коефіцієнт α_a стає від'ємним. На відміну від цього, у політині $2C$ параметр a слабо залежить від температури і виявляє тенденцію до зменшення при зростанні температури. Виявлений характер залежності $a(T)$ свідчить про утворення у політині C неспіврозмірної модульованої структури зі статичними зсувами атомів вздовж вісі OX при $T = 214$ К і відсутність таких зсувів вздовж OX у політині $2C$.

Ключові слова: Модульовані структури, рентгенівська дилатометрія, статичний зсув атому

The unit cell parameters a , b and c for C and $2C$ polytypes of TlInS_2 crystals were experimentally investigated by X-ray dilatometry method in temperature range 180 K – 300 K. It was revealed that the temperature dependences of the unit cell parameters a , b and c for such polytypes demonstrated significant differences. In C -polytype samples parameter a in the interval 226 K – 300 K was characterized by a positive coefficient of linear expansion (α_a), in the interval 214 K – 226 K parameter a remained the same, while at $T < 214$ K the coefficient α_a became negative. In contrast, in crystals of $2C$ polytype parameter a was weakly dependent on temperature and tended to decrease with increasing the temperature. The revealed character of the dependence $a(T)$ testified about formation in crystals of C polytype of incommensurate phase with static displacement of atoms along axis OX at $T = 214$ K and absence of static displacement along OX in $2C$ polytype.

Keywords: modulated structures, X-ray dilatometer method, static atomic displacement

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

Важливою особливістю напівпровідників-сегнетоелектриків $\beta\text{-TlInS}_2$ є існування в них фазових переходів (ФП), при яких виникають фази як з співрозмірними, так і неспіврозмірними модульованими структурами. Незважаючи на численні експериментальні дослідження, відомі в літературі дані щодо механізмів і температур ФП "параелектрична фаза – неспіврозмірна фаза

(НФ)" та "НФ – співрозмірна фаза (СФ)" у цих кристалах є досить суперечливими [1-4]. Наприклад, за даними нейтронної дифракції [2] модуляційні сателіти, що відповідають НФ, спостерігаються в інтервалі температур $T = 200 - 216$ К і мають вектор модуляції $q(\delta; \delta; 0,25)$ ($\delta = 0,012$), тоді як згідно з результатами рентгеноструктурного аналізу [3,4] вектор модуляції складає $q(\mp\delta; 0; \pm 0,25)$

($\delta=0,04$) в області температур $T=194\text{ К} - 214\text{ К}$. Для пояснення цих та ряду інших розбіжностей параметрів НФ було запропоновано враховувати той факт, що для TlInS_2 характерним є існування ряду політипів – C , $2C$, $4C$ та $8C$ з параметром елементарної комірки $c = c'$, $2c'$, $4c'$, $8c'$ ($c' \approx 15\text{ Å}$) відповідно [5]. Зокрема, в наших недавніх роботах [4,6] показано, що в кристалах TlInS_2 $2C$ -політипу, на відміну від C -політипу, модуляційні сателіти як НФ, так і СФ взагалі не спостерігаються, що свідчить про відсутність хвиль співрозмірної та неспіврозмірної модуляції. Раніше було встановлено, що для C та $2C$ політипів TlInS_2 істотно відрізняються і температурні залежності параметра c [7]. Суттєво, що температурна поведінка інших параметрів елементарної комірки a , b як для політипу C , так і $2C$, взагалі експериментально не досліджувалася. В той же час, залежності параметрів елементарної комірки від температури є чутливими до перебудови кристалічної ґратки і за їх змінами можна визначити характеристики ФП, що відбуваються у кристалі. Тому в представленій роботі для кристалів TlInS_2 C та $2C$ політипів методом рентгенівської чотириколової дифрактометрії було виконано дослідження температурних залежностей параметрів елементарної комірки a, b, c в діапазоні температур $T = 180\text{ К} - 300\text{ К}$.

Методика експерименту

Дослідження структури кристалів TlInS_2 виконувалося з використанням рентгенівського дифрактометра ДРОН-4-07 з чотириколовою гоніометричною приставкою ГП-15. $K\alpha$ -лінії Co та Ni виділялися з первинного поліхроматичного випромінювання трубки БСВ-29 монохроматором на основі піролітичного графіту. Режим роботи трубки складав: напруга 30 кВ , сила струму 30 мА . Зразки розміщувалися в температурній камері і охолоджувалися потоками парів рідкого азоту. Типовий розмір зразків $7 \times 4 \times 0,5\text{ мм}$. Температура зразків підтримувалася з точністю до $0,5\text{ К}$ (з урахування можливих температурних градієнтів у зразку) за допомогою температурного регулятора ВРТ-2. При юстуванні рентгенівський пучок був спрямований вздовж площин сколювання $(00l)$. Діаметр рентгенівського пучка на поверхні зразка не перевищував 1 мм . Сканування виконувалося у площинах оберненої ґратки вздовж рядів, які розходилися з початку координат оберненого простору. Кроки сканування: $\Delta\chi=0,05 - 0,10^\circ$, $\Delta(2\theta)=0,03 - 0,08^\circ$,

залежно від області оберненого простору, час накопичення сигналу $3 - 10\text{ с}$.

Результати та обговорення

Кристали $\beta\text{-TlInS}_2$ за нормальних умов належать до просторової групи $C2/c$ моноклінної сингонії і мають шарувату будову, зумовлену упакуванням шарів вздовж напрямку $[00l]$. Моноклінна елементарна комірка C -політипу TlInS_2 містить 16 формульних одиниць та при $T = 290\text{ К}$ характеризується параметрами $a = 10,90\text{ Å}$, $b = 10,94\text{ Å}$, $c = 15,18\text{ Å}$, $\beta = 100,21^\circ$ [3]. У політипі $2C$ параметр c є подвоєним і в кристалах, що досліджувалися в представленій роботі, за кімнатної температури він складає $c = 30,32\text{ Å}$.

На першому етапі роботи досліджувалася залежність $c(T)$. Для цього визначалося кутове положення рефлексу 00.14 (для $2C$ -політипу -00.28) в діапазоні температур $T = 180\text{ К} - 300\text{ К}$ з кроком по температурі $\Delta T = 2\text{ К}$. Оскільки квадратична форма для моноклінної сингонії має вигляд

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{1}{\sin^2 \beta} \left(\frac{H^2}{a^2} + \frac{L^2}{c^2} - \frac{2HL \cos \beta}{ac} \right) + \frac{K^2}{b^2} \quad (1)$$

(d_{hkl} - міжплощинна відстань), то для 00.14 -рефлексу $c = 14d_{00.14} / \sin \beta$. Величина $d_{00.14}$ визначалася за кутовим положенням максимуму: $d_{00.14} = \lambda / 2 \sin \theta_{00.14}$ (λ - довжина хвиль $K\alpha_{1,2}$ - випромінювання).

Для визначення залежностей $a(T)$ та $b(T)$ вимірювалися кутові положення рефлексів 808 та 088 відповідно, оскільки конструктивні особливості температурної камери не дозволяли безпосередньо досліджувати рефлекси типу $H00$ та $0K0$. Тоді, для рефлексів $H0L$ параметр a визначається як корінь рівняння

$$\left(\frac{c^2 \sin^2 \beta}{d_{H0L}^2} - L^2 \right) a^2 - (2cHL \cos \beta) a - H^2 L^2 = 0, \quad (2)$$

а для $0KL$ параметр b дорівнює

$$b = K \left(d_{0KL}^{-2} - c^{-2} L^2 \sin^2 \beta \right)^{-1/2} \quad (3)$$

Таким чином, експериментально вимірювалися температурні залежності міжплощинних відстаней d_{808} та d_{088} і за формулами (2), (3) обчислювалися значення параметрів a, b . Необхідна для такого розрахунку залежність $c(T)$ була попередньо експериментально

визначена. Відносна похибка визначення параметрів a, b, c складала відповідно $2,8 \cdot 10^{-4}$, $2,2 \cdot 10^{-4}$ та $1,8 \cdot 10^{-4}$ (при брегівському куті $\theta \approx 50^\circ$ та абсолютній похибці $\Delta\theta = 0,01^\circ$).

На рис. 1 наведено експериментально визначені залежності параметрів елементарної комірки кристалів TlInS_2 C-політипу. Залежність

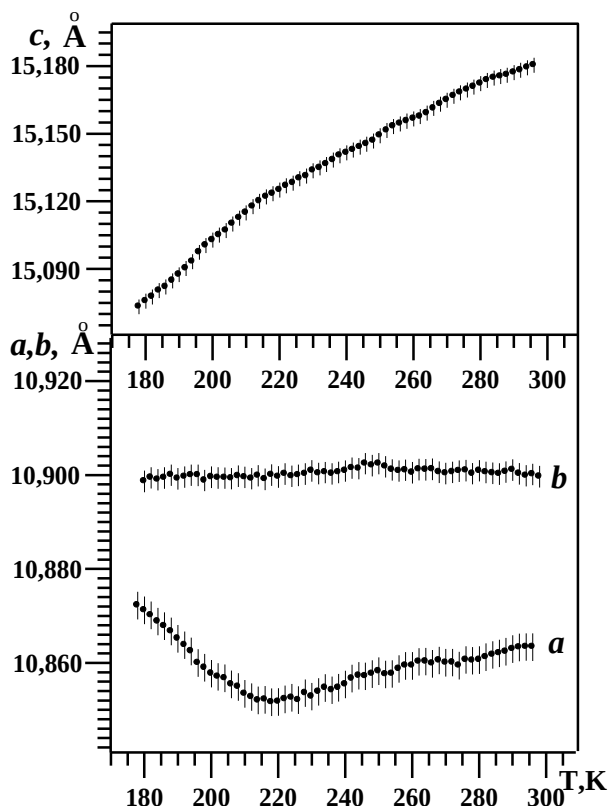


Рис. 1. Залежності параметрів a, b, c елементарної комірки кристалів TlInS_2 C-політипу

$c(T)$ практично збігається з отриманою нами раніше [7] для зразків інших технологічних партій. Її характерною особливістю є зміна кута нахилу в околі 214 К – 216 К та стрибкоподібна зміна при 196 К, величина якої, проте, близька до абсолютної похибки $\Delta c \approx 0,003 \text{ Å}$. Лінійний коефіцієнт теплового розширення $\alpha_c = (\partial c / \partial T) / c$ на ділянці 215 К – 300 К додатний і складає $4,9 \cdot 10^{-5}$, а в інтервалі 180 К – 215 К дорівнює $8,6 \cdot 10^{-5}$. Звертає на себе увагу істотна відмінність температурних залежностей параметрів a, b від $c(T)$. Зокрема, параметр b в усьому розглянутому діапазоні температур залишається майже сталим ($\alpha_b = (\partial b / \partial T) / b = 7,8 \cdot 10^{-7}$), тоді як залежність $a(T)$ виявляє суттєво різний характер у різних температурних областях. В інтервалі 226 К – 300 К параметр

$\alpha_a = (\partial a / \partial T) / a = 1,3 \cdot 10^{-5}$, в області температур 214 К – 226 К він практично сталий, а при $T < 214 \text{ К}$ змінює знак $\alpha_a = -5,2 \cdot 10^{-5}$. Таким чином, температурна поведінка параметра a відображує перебудову кристалічної ґратки C-політипу TlInS_2 в околі 214 К, в результаті якої змінюється характер теплового розширення кристалу. Відомо, що статичні зсуви атомів при утворенні НФ, як правило, призводять до аномалій у теплових зміщеннях атомів [8]. Тому виявлена зміна залежності $a(T)$ при 214 К свідчить про те, що статичні зсуви атомів відбуваються саме вздовж осі OX .

На рис. 2 представлено експериментально визначені залежності параметрів a, b, c кристалів TlInS_2 2C-політипу. Перш за все, залежність $c(T)$ є практично лінійною і не містить особливостей, характерних для кристалів політипу C. В усьому дослідженому інтервалі температур лінійний коефіцієнт теплового розширення у напрямку OZ сталий і дорівнює $\alpha_c = 5,7 \cdot 10^{-5}$, що досить близько до величини α_c кристалів політипу C на ділянці 215 К – 300 К. Отже, теплове розширення кристалів C та 2C політипів вздовж напрямку OZ при $T > 214 \text{ К}$ є схожим, а відмінності виникають

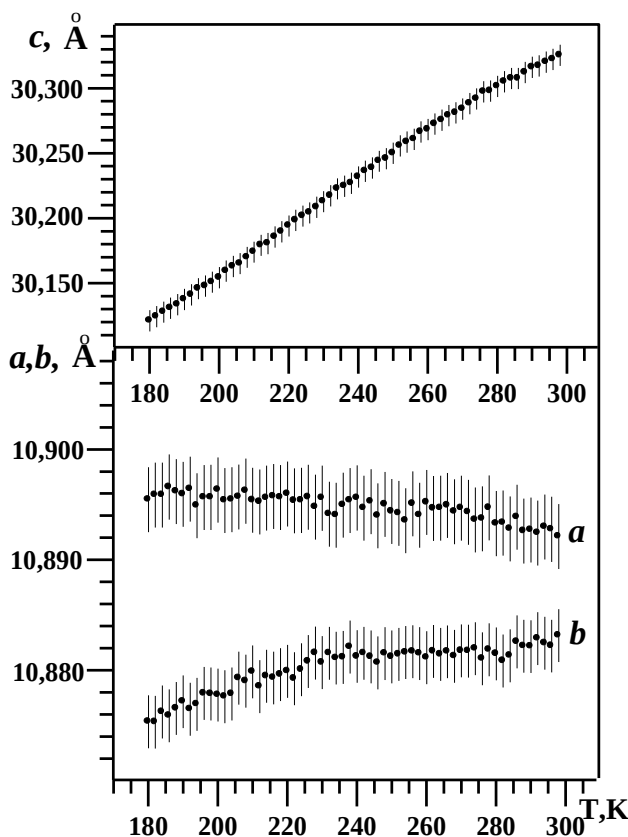


Рис. 2. Залежності параметрів a, b, c елементарної комірки кристалів TlInS_2 2C-політипу

лише при появі НФ (або при $T < 196\text{ К}$ – появі СФ) у кристалах C -політипу. Необхідно відзначити, що у кристалах $2C$ -політипу температурна зміна параметра b дещо сильніша, ніж у C -політипі, – коефіцієнт теплового розширення для цього напрямку складає $\alpha_b = 6,1 \cdot 10^{-6}$. Крім того, в області 220 К спостерігається перегін залежності $b(T)$, величина якого, втім, близька до похибки експерименту. Однак найбільша відмінність між політипами C та $2C$ спостерігається у температурних залежностях параметра a . У $2C$ політипі параметр a майже не залежить від температури і виявляє тенденцію до зменшення при зростанні температури ($\alpha_a = -2,6 \cdot 10^{-6}$). Відсутність особливостей на залежності $a(T)$ є додатковим свідченням відсутності

модульованих структур в кристалах $2C$ -політипу в діапазоні температур $180\text{ К} - 300\text{ К}$.

Висновки

У роботі експериментально встановлено, що температурна поведінка параметра a відображує перебудову кристалічної ґратки C -політипу TlInS_2 в околі 214 К , в результаті якої змінюється характер теплового розширення кристалу. Оскільки температура $T = 214\text{ К}$ відповідає ФП "парафаза $\leftrightarrow$ НФ", то поява неспіврозмірної хвилі модуляції впливає на силові константи кристалу таким чином, що змінює знак коефіцієнта α_a . Виявлена зміна залежності $a(T)$ при 214 К свідчить про те, що статичні зсуви атомів відбуваються вздовж осі OX .

References

Список використаних джерел

1. Panich A. M. Electronic properties and phase transitions in low-dimentional semiconductors. / Panich. // *Journal of Physics. Condensed Matter*. – 2008. – V.20. – №29. – P. 293202–293244.
2. Vakhrushev S. Incommensurate phase transition in TlInS_2 crystal. / Vakhrushev S., Zhdanova V., Kvyatkovskii B. // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 1984. – V.39. – P. 245–247.
3. Kashida S. X-ray study of the incommensurate phase of TlInS_2 / Kashida S. // *Journal of Physics. Condensed Matter*. – 1999. – V.11. – P. 1027–1035.
4. Salnik A. V. The incommensurate phase transformation in TlInS_2 ferroelectric / A. V. Salnik Y. P. Gololobov, N. A. Borovoy. // *Ferroelectrics*. – 2015. – V.484. – P. 62–68.
5. O. Z. Alekperov. Polytypes of Monoclinic TlInS_2 / O. Z. Alekperov, A. I. Nadzhafov. // *Inorganic Materials*. – 2009. – V.45. – P. 7–12.
6. A.V. Nikolaienko. The effect of X-ray irradiation on formation and decay of the incommensurate phase in TlInS_2 crystals./A.V. Nikolaienko, Yu.P. Gololobov, N.A. Borovoy.//*Physica Status Solidi (B)*. – 2017. – V.254. – №2. – P. 2885–2889.
7. N. A. Borovoi. On the Ferroelectric Phase Transition in Polytypes of b- TlInS_2 Crystals. / N. A. Borovoi, Yu. P. Gololobov, A. N. Gorb, G. L. Isaenko.// *Physics of the Solid State*. – 2008. – V.50. – №10. – P. 1946–1950.
8. N. B. Bolotina. X-Ray Diffraction Analysis of Modulated Crystals: Review. // *Crystallography Reports*. – 2007. – V.52. – №4. – P.647–658.

1. PANICH, A. M. (2008) Electronic properties and phase transitions in low-dimentional semiconductors. *Journal of Physics. Condensed Matter*. 20 (29). p. 293202 (42 p.).
2. VAKHRUSHEV, S., ZHDANOVA, V., KVIATKOVSKII, B. (1984) Incommensurate phase transition in TlInS_2 crystal. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 39, p. 245–247.
3. KASHIDA, S., KOBAYASHI, Y. (1999) X-ray study of the incommensurate phase of TlInS_2 . *Journal of Physics. Condensed Matter*. 11, p. 1027–1035.
4. SALNIK, A., GOLOLOBOV, YU. P. and BOROVOY, N.A. (2015) The incommensurate phase transformation in TlInS_2 ferroelectric. *Ferroelectrics*. 484. p. 62–68.
5. ALEKPEROV, O. Z., NADZHAFOV, A. I. (2009) Polytypes of Monoclinic TlInS_2 . *Inorganic Materials*. 45. p. 7–12.
6. NIKOLAIENKO, A.V., ZLOI, O.S., ISAIEV, M.V., A.V., GOLOLOBOV, YU. P., BOROVOY, N.A. (2017) The effect of X-ray irradiation on formation and decay of the incommensurate phase in TlInS_2 crystals. *Physica Status Solidi (B)*. 254(2). p. 2885–2889.
7. BOROVOI, N. A., GOLOLOBOV, YU. P., GORB A. N, ISAENKO, G. L. (2008) On the Ferroelectric Phase Transition in Polytypes of b- TlInS_2 Crystals. *Physics of the Solid State*. 50(10). p. 1946–1950.
8. BOLOTINA, N. B. (2007) X-Ray Diffraction Analysis of Modulated Crystals: Review. *Crystallography Reports*. 52(4). p.647–658.

Надійшла до редколегії 22.02.17

УДК 539.194

Поперенко Л.В.¹, д.ф.-м.н, проф.,
Пророк В.В.¹, к.ф.-м.н, с.н.с.,
Розуван С.Г.¹, к.ф.-м.н, н.с.,
Шайкевич І.А.¹, д.ф.-м.н, проф.

L.V. Poperenko¹, Dr.Sc., Prof.,
V.V. Prorok¹, Ph.D., Sen. Sci. Res.,
S.G. Rozouvan¹, Ph.D., Sci. Res.,
I.A. Shaykevich¹, Dr.Sc., Prof.

Скануюча тунельна мікроскопія вітаміну B₁₂

Scanning tunneling microscopy of vitamin B₁₂

¹Київський національний університет імені
Тараса Шевченка 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13, e-mail: sgr@univ.kiev.ua

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: sgr@univ.kiev.ua

Вітамін B₁₂ (ціанокобаламін) нанесений на поліровану мідь вивчався за допомогою методик скануючої тунельної мікроскопії з атомною просторовою роздільною здатністю та оптичної спектроскопії. Скануюча тунельна мікроскопія дозволила зареєструвати атоми кобальту, які входять до складу молекули вітаміну B₁₂ і мають вищий від оточуючих атомів електричний потенціал. Результати були пояснені за допомогою квантовомеханічних розрахунків за методикою функціоналу густини.

Ключові слова: вітамін B₁₂, скануюча тунельна мікроскопія, кобальт.

Vitamin B₁₂ (cyanocobalamin) deposited on polished copper surface was studied by scanning tunneling microscopy with atomic spatial resolution, atomic force microscopy and optical spectroscopy. This chemical compound was chosen for experiments because its chemical structure contains heavy cobalt atom. Vitamin B₁₂ on the copper surface revealed crystal structure, with the degree of spatial ordering which decreases with smaller sizes of crystals. Scanning tunneling microscopy allowed us to register single cobalt atoms as a part of B₁₂ molecule structure. The atoms had higher than neighboring atoms electrostatic potential and were visible on the scanning tunneling microscopy scans as very bright spots. Numerical quantum mechanical density functional theory calculations were performed as a part of the studies. The experimentally registered cobalt atoms as a bright spots were explained both as having higher vertical coordinate in respect to the copper surface and additional positive electric charge.

Key Words: vitamin B₁₂, scanning tunneling microscopy, cobalt.

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

Скануюча тунельна мікроскопія (СТМ) з моменту її винаходу та використання в наукових дослідженнях [1] зарекомендувала себе як унікальна експериментальна методика дослідження атомної структури провідних тіл. В той же час, незважаючи на вражаючі приклади її застосування для кристалічних зразків, вона не так ефективна при вивченні органічних високомолекулярних сполук. Частково це можна пояснити відсутністю локалізації хвильових функцій складної молекули до її атомів [2], як це відбувається у випадку кристалічних тіл. В той же час, якщо органічна молекула містить важкий атом, хвильова функція має бути частково локалізована в околі цього атому. Як приклад такого роду речовин можна назвати вітамін B₁₂,

який містить атом кобальту (хімічна формула C₆₃H₈₈CoN₁₄O₁₄P). Важливість цієї речовини для організму людини призвела до інтенсивних досліджень структури молекули B₁₂ на протязі багатьох десятиліть [3], які були відзначені трьома Нобелівськими преміями по хімії і однією по медицині (1934, 1964, 1965 та 1981 роки). Внаслідок складної хімічної структури молекули вітаміну її наближений квантово-механічний розрахунок, аналіз оптичних властивостей є надзвичайно трудомістким [4]. З точки зору застосування скануючої тунельної мікроскопії, важливим є вивчення процесів взаємодії молекул ціанокобаламіну з поверхнею, а також особливості, пов'язані з важким атомом кобальту у її складі. Такі задачі і були поставлені нами при виконання даних досліджень.

Експериментальна частина.

Для приготування зразка, водний розчин вітаміну В₁₂ був нанесений на скло і після випаровування вивчався за допомогою оптичної мікроскопії та атомно-силової мікроскопії. Результати експериментів представлені на рис. 1. Як видно з результатів оптичної мікроскопії ціанокобаламін на поверхні скла структурований у вигляді кубічних мікрокристаліків правильної форми розмірами в десятки мікрон. В той же час структура цього ж зразка зареєстрована з більшою просторовою роздільною здатністю (50 нанометрів) за допомогою атомно-силової мікроскопії демонструє понижений рівень впорядкованості на субмікронному рівні - кубічна форма мікрокристаліків розмірами в одиниці мікрон - відсутня.

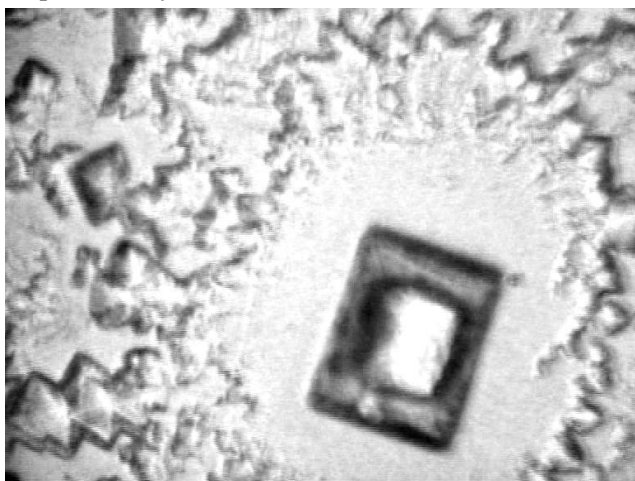


Рис. 1. Оптична мікроскопія кристаліків ціанокобаламіну на склі. Висота рисунку 50 мікрон.

Для більш детального вивчення структури молекули вітаміну В₁₂ ми використовували скануючий тунельний мікроскоп на базі нанолaboratorії ІНТЕГРА, що дозволяло нам реєструвати топологію поверхні з просторовою роздільною здатністю, яка досягала 0,08 нм. Гостру голку для СТМ ми виготовляли з дроту діаметром 0,5 мм, зі сплаву Pt_{0.8}Ir_{0.2}, виготовленого шляхом механічного відрізання його кінця.

Для виготовлення зразків з мономолекулярними шарами вітаміну ми використовували швидке випаровування водного розчину вітаміну у вакуумі- після нанесення краплі розчину на поліровану мідь, зразок вносився у вакуумну камеру.

Детальні експерименти на тунельному мікроскопі виявили, що тунельний режим на

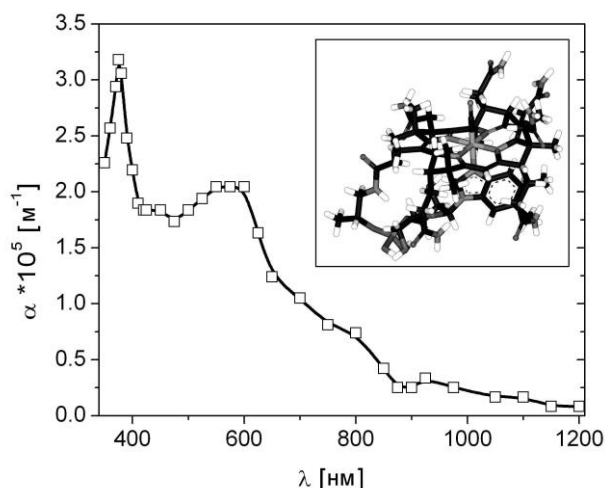


Рис. 2. Спектральна залежність оптичного поглинання кристаліків ціанокобаламіну на поверхні скла. Поглинання приведено в довільних одиницях. В рамці представлена схематична структурна формула молекули вітаміну В₁₂.

даному зразку досягається тільки при напругах на голці вище 5 вольт. Для аналізу цього ефекту нами була виміряна залежність оптичного поглинання зразка з рис. 1. На спектральній кривій оптичного поглинання (рис. 2) отриманій на спектрофотометрі СФ-26 та обчислений з урахуванням френелівського відбивання на межах В₁₂- повітря та В₁₂- скло, помітні два максимума поглинання- один широкий в області 550нм, а другий вузький і високий з максимумом в області 375 нм (3,3 еВ). Широкий максимум можна віднести до смуги поглинання молекули В₁₂, а вузький- до атома кобальту. Останнє добре узгоджується з даними роботи [5], де приведені криві оптично провідності кобальту мають максимум при 3.2 еВ. Теоретична крива, в моделі прямих міжзонних переходів розрахована в [6] з прямим обчисленням матричних елементів переходів має максимум в області 3.5 еВ. Аналогічний максимум в цій спектральній області має крива розрахована в наближенні непрямих міжзонних переходів [5], але цей максимум широкий. Для нейтрального неіонізованого атому кобальта згідно [7] має місце перехід з поглинанням з нижніх ⁴F на верхні ²D рівні з енергією переходу 3еВ.

В дугових спектрах випромінювання спостерігається інтенсивна лінія 389.4 нм, яка набагато інтенсивніша в порівнянні з сусідніми лініями [8].

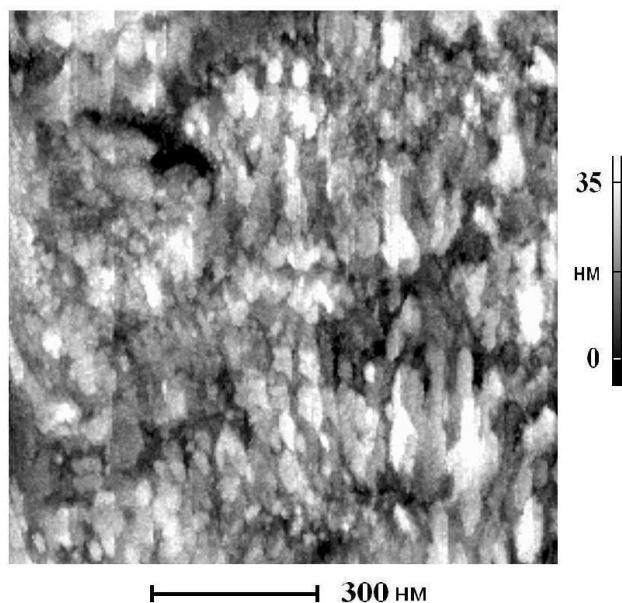


Рис. 3. Скануюча тунельна мікроскопія гранул ціанокобаламіну на поверхні міді. Просторова роздільна здатність вимірів 4 нм.

Тунелювання з шару ціанокобаламіну досягається тільки при наявності носіїв в його зоні провідності. При досягненні атомної роздільної здатності скануючої тунельної мікроскопії, для реєстрації атомів кобальту потрібне тунелювання електрону зі збудженого заповненого рівня атома кобальту, що накладає умови на робочі напруги в експерименті.

Результати скануючої тунельної мікроскопії поверхні міді з нанесеним шаром вітаміну V_{12} представлені на рис. 3. Ми бачимо окремі гранули розмірами десятки-сотні нанометрів на поверхні міді, які вже не можна ідентифікувати як нанокристалики оскільки їх краї вже не є прямими лініями. Тобто ступінь просторового впорядкування ціанокобаламіну з подальшим зменшенням діапазону реєстрації до сотень нанометрів зменшується в порівнянні з даними на рис. 1.

Результати СТМ цього ж зразка з атомною просторовою роздільною здатністю представлені на рис. 4. По-перше, ми можемо сказати, що в точці сканування ми спостерігаємо мономолекулярний острівковий шар молекул ціанокобаламіну оскільки в проміжках видні впорядковані атоми міді підкладки (справа внизу). По-друге, на рисунку помітні декілька значно яскравіших атомів (окил одного з них представлений на рисунку 4 у збільшеному вигляді), які ми ідентифікуємо як атоми кобальту. Атом кобальту на збільшеній частині рисунка оточений темними проміжками, які можна

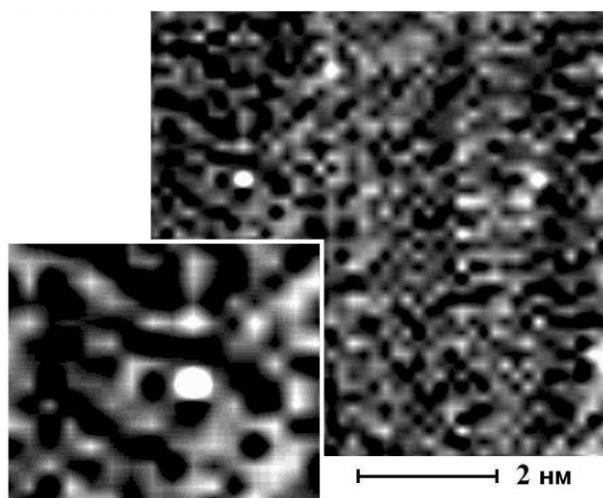


Рис. 4. Скануюча тунельна мікроскопія молекул ціанокобаламіну на поверхні міді. Просторова роздільна здатність вимірів 0.08 нм.

ідентифікувати як zdeформовані гетероциклічні кільця молекули V_{12} (див. структурну формулу V_{12} з рис.2)

Більш яскраві точки на СТМ сканах можуть бути наслідком трьох причин- 1. Більшої висоти рельєфу поверхні в даній точці, 2. Вищого електричного потенціалу в даній точці, 3. Вищої концентрації носіїв електричного заряду в даній точці в порівнянні з оточуючими областями.

Для аналізу просторового розподілу електричного потенціалу поверхні міді нами були проведені розрахунки за методом функціоналу густини для плоскої надкомірки міді ($2 \times 2 \times 1$) з атомом кобальту та атомом вуглецю на її поверхні. Для розрахунків використовувався

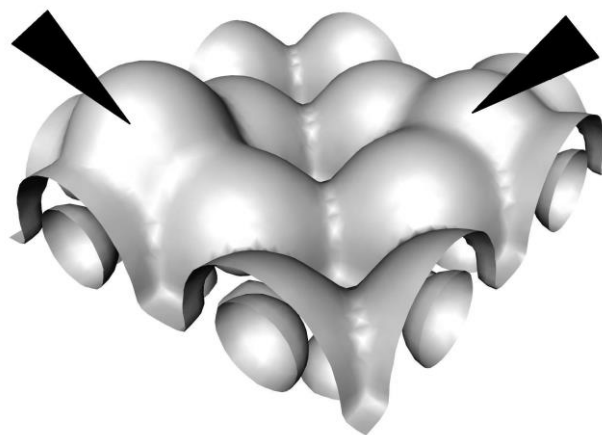


Рис. 5. Розраховані еквіпотенціальна поверхня поблизу рівня Фермі для атомів кобальту (лівий) та вуглецю (правий) (позначені стрілками) на поверхні міді в мінімумі енергії.

пакет програм ABINIT в операційній системі LINUX.

Використовуючи метод градієнтного спуску, програма шукала таке положення атомів кобальту та вуглецю, яке б мінімізувало загальну енергію системи. Результати розрахунків фінального положення атомів представлені на рис.5. Різниця висот цих двох атомів становить 0.047 нм. З фізичної точки зору це зрозуміло- атом кобальту має більшу кількість електронів, а значить і більший діаметр незаповненої зовнішньої електронної оболонки, що приводить до більшої дистанції між ним і поверхнею мідного кристалу в порівнянні з атомом вуглецю. Також атом кобальту в молекулі вітаміну B₁₂ має позитивний заряд, що приводить до додаткового збільшення його яскравості на СТМ зображеннях.

Висновки

Вітамін B₁₂ нанесений на поверхню міді має кристалічну структуру, ступінь просторового впорядкування якої зменшується зі зменшенням розмірів кристаліків та зменшенням товщини його шару. Атоми кобальту, які входять до складу молекули вітаміну можуть бути однозначно ідентифіковані при використанні методики скануючої тунельної мікроскопії, при цьому можна припустити, що тунелювання електрону відбувається зі збудженого рівня атома кобальта. З чисто практичної точки зору, це дозволяє знаходити і вивчати надзвичайно малі концентрації (аж до окремих молекул) вітаміну B₁₂, а також інших органічних молекул з приєднаними до них важкими атомами.

Список використаних джерел

1. Binning G. Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy / G. Binning, H. Rohrer, Ch. Gerber, E. Weibel// Physical Review Letters. -1982. -v.49. -№1. -C.57-61.
2. Розуван К.П. Скануюча тунельна мікроскопія тонких плівок барвника / К.П. Розуван, С.Г. Розуван, І.А. Шайкевич // Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. -2012. - №1. -С.359-364.
3. Scott J.M. The Discovery of Vitamin B₁₂ / J.M. Scott, A.M. Molloy // Annals of Nutrition and Metabolism. -2012. -v. 61. -№. 3. -C. 239–245.
4. Kornobis K. Electronically Excited States of Vitamin B₁₂: Benchmark Calculations Including Time-Dependent Density Functional Theory and Correlated Ab Initio Methods / K. Kornobis, N. Kumar, B. M. Wong, та ін. // J. Phys. Chem. A. - 2011. -v.115. №7. С. 1280–1292.
5. Поперенко Л.В. Діагностика поверхні поляризованим світлом/ Л.В. Поперенко, В.С. Сташук, І.А. Шайкевич, В.А. Одарич. - Київ: ВПЦ „Київський Університет”, 2007. -336 с.
6. Kulikov N.I. Electronic band structure of Fermi surface and optical properties of cobalt under pressure / Kulikov N.I., Kubatov E.T. // J. Phys.F. - 1982. -v.2. -№10. -C. 2267-2289.
7. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М.А.Ельяшевич. - Москва: ГИФМЛ, 1962, -892с.
8. Зайдель А.Н. Таблицы спектральных линий. / А.Н. Зайдель, В.К.Прокофьев, С.М.Райский, та ін. - Москва: Наука, 1977. -798 с.

References

1. BINNING, G., ROHRER, H. et al. (1982) Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy. *Physical Review Letters*. 49(1). p.57-61.
2. ROZOUVAN, K.P., ROZOUVAN, S.G. & SHAIKEVICH, I.A. (2012) Scanning tunneling microscopy of dye thin films. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physics & Mathematics*. 1. p.359-364.
3. SCOTT J.M., MOLLOY A.M. (2012) The Discovery of Vitamin B₁₂. *Annals of Nutrition and Metabolism*. 61(3). p. 239–245.
4. KORNOBIS, K., KUMAR, N., et al. (2011) Electronically Excited States of Vitamin B₁₂: Benchmark Calculations Including Time-Dependent Density Functional Theory and Correlated Ab Initio Methods. *J. Phys. Chem. A*. 115(7). p. 1280–1292.
5. POPERENKO, L.V., STASHCHUK, V.S., SHAIKEVICH I.A., ODARYCH V.A. (2007) *Diagnoses of surface by polarized light*. Kyiv: Kyiv University Press.
6. KULIKOV, N.I., KUBATOV, E.T. (1982) Electronic band structure of Fermi surface and optical properties of cobalt under pressure. *J. Phys.F.*, 2(10). p.2267-2289.
7. ELYASHEVICH, M.A. (1962). *Atomic and molecular spectroscopy*. Moscow: GIFML.
8. ZAYDEL, A.N., PROKOFYEV, V.K., RAYSKIY, S.M., et al. (1977). *Tables of spectral lines*. Moscow: Nauka.

Надійшла до редколегії 27.01.17

УДК 535.341.08, 535.342, 53.096.

Сіжук А. С.¹, к.ф.-м.н.

Спостереження когерентного перевипромінювання пару HF у багатопрохідній комірці Уайта

^{1,2}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: ¹andrii.sizhuk@gmail.com,

A. S. Sizhuk¹, PhD.

The observation of the coherent reemission by HF vapor in the multiple-path White cell

^{1,2}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: ¹andrii.sizhuk@gmail.com,

У роботі продемонстровано інфрачервоний фур'є спектр пару фторводню (формула HF) при кімнатній температурі та тискові порядку 1 Па. Була спостережена група відносно щільно розташованих ліній поглинання та перевипромінювання біля резонансного коливально-обертального переходу $\nu_1 = 0 \rightarrow 1$ та $j = 0 \rightarrow 1$ при багаторазовому проходженні інфрачервоного променя змінної частоти через оптичну комірку Уайта.

Ключові слова: поглинання, інфрачервоний фур'є спектр, квантова оптика, ефект Доплера, коливально-обертальний спектр, фтороводень.

In this work the infrared spectrum of room-temperature HF vapor at millitorr pressures is demonstrated. The spectrum was obtained by means of Infrared Fourier Spectroscopy. It was observed the group of relatively densely located absorption and reemission lines near a resonant ro-vibrational transition, namely $\nu_1 = 0 \rightarrow 1$ and $j = 0 \rightarrow 1$. The spectrum corresponds to the detected intensity of infrared beam of variable frequency after passing the optical multiple-path White cell with the vapor. The Lamb splitting, the nonhomogeneous Doppler effects, a superradiance, and collective quantum-optical effects are discussed in order to build a model of the spectrum. A quantum optics character of the observed effect is assumed. Mainly, the system of molecules interacting with the oppositely directed scanning beams, at the densities of order $0.5 \times 10^3 - 1 \times 10^3$ molecules per resonant cubic wavelength, can be in a coherent states with a probability defined by a magnitude of intermolecular interaction. This intermolecular interaction is nonlinear with respect to the molecular density. At this point, the type of the intermolecular interaction is determined by the so-called quantum optical dipole-dipole interaction. The quantum optical dipole-dipole interaction is caused by the exchange of quanta of field energy between molecules.

Key Words: absorption, infrared Fourier spectrum, quantum optics, Doppler effect, ro-vibrational spectrum, hydrogen fluoride.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Єжов С.М.

Вступ

Дослідження ефектів підсилення інтенсивності оптичного пучка в оптично активних середовищах, спричиненого колективними когерентними станами, мають значимість при подальшому вивченні механізмів вимушеного та невимушеного випромінювання. У свою чергу, знання механізмів вимушеного та невимушеного випромінювання є актуальними та важливими при розрахунках та побудові неперервних та імпульсних когерентних джерел (мазерів та лазерів: див., наприклад, [1]).

Відомим прикладом піонерської роботи по спостереженню колективного

перевипромінювання є робота Шкрібановіча [2]. У згаданій роботі описано спостереження ефекту імпульсного надвипромінювання Діке (див. [3]) у пару фтороводню оптично (в інфрачервоній області біля резонансного коливально-обертального переходу) збудженого (значна інверсія на збудженому стані) фтороводню при кімнатній температурі та міліторах тиску (порядку 1 Па). Іншими прикладами досліджень в області оптичних колективних явищ можна привести такі роботи, як [4] – [7].

У даній роботі продемонстровано фур'є спектр пару фтороводню (формула HF) при кімнатній температурі та тискові порядку 1 Па (область тисків мілітор) без оптичної накачки.

Була спостережена група відносно щільно розашованих ліній поглинання та перевипромінювання при багаторазовому проходженні інфрачервоного променя змінної частоти через оптичну комірку Уайта. Таким чином, сформульована версія, що, при певних умовах, пар HF може перевипромінювати сигнал, визваний певною когерентністю між молекулами та полем при переході $j = 0 \rightarrow 1$ (так звана R-крило) та $\nu_1 = 0 \rightarrow 1$ (фундаментальна частота відносних коливань атома водню у мономері HF).

Укспериментальні результати

На рис. 1 показано результат фур'є сканування пару HF у ємкості 2-ох метрової довжини (та приблизно 0.18 м діаметром) при кімнатній температурі та тисках порядку 1 Па та 10 Па (верхній графік та нижній, відповідно).

(2000 – 25000 cm^{-1}). У цих експериментах детектор InSb з інструментальною розділовою здатністю 0.01 cm^{-1} охолоджувався рідким азотом. Число сканувань рівне 10. Апертура встановлена діаметром 1 мм. Оптичний шлях налаштовано порядку 60 м.

Як видно з представлених сканувань на рис. 1, резонансна лінія коливально-обертального поглинання $\nu_1 = 0 \rightarrow 1$ та $j = 0 \rightarrow 1$, що відповідає частоті приблизно 4001 cm^{-1} , є чітко вираженою для вищих тисків (нижній графік на рис. 1). Для тисків нижче 1 Па (верхній графік на рис. 1) спостерігалась група поглинально-випромінювальних переходів.

Обговорення експериментально спостережуваних

Розглянемо декілька версій пояснень спостережуваних серії ліній з перевипромінювання.

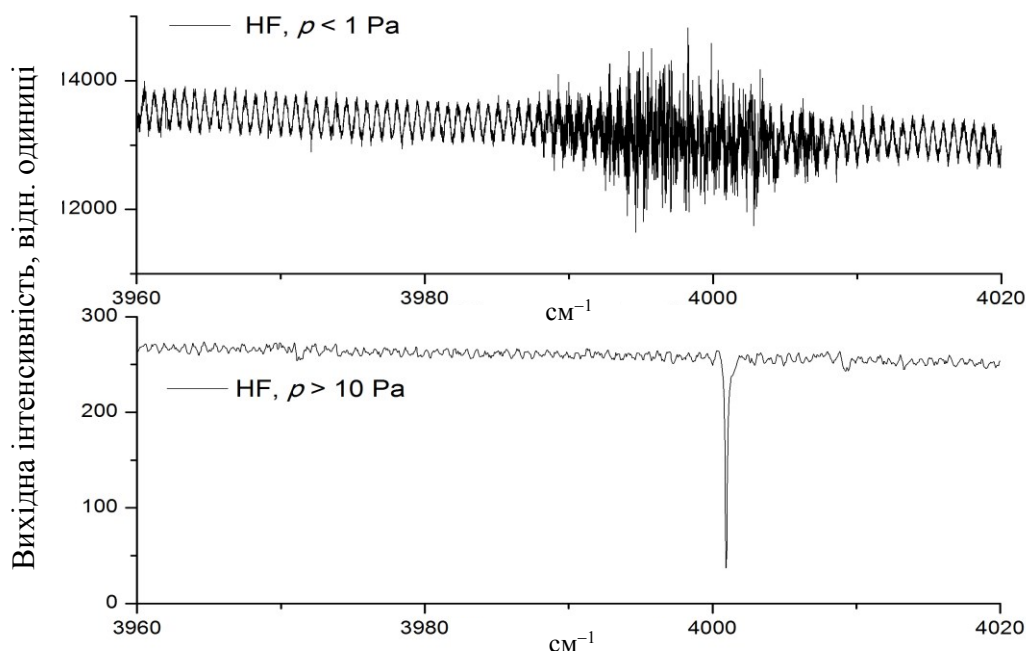


Рис. 1. Фур'є спектр інфрачервоного променя після проходження через багатопрхідну оптичну комірку Уайта з паром HF для тиску $p < 1$ Па (верхній спектр) та для тиску $p > 10$ Па (нижній спектр).

Якщо вирівнюванням дзеркал у багатопрхідній ємкості (комірці Уайта) знехтувати, головний внесок у експериментальну похибку є інструментальним. Для сканування був використаний фур'є спектрометр BOMEM DA8 Fourier transform spectrometer system та криогенна система охолодження з детектором InSb (1800-14000 cm^{-1}), вікнами CaF_2 (область прозорості 1200 - 8500 cm^{-1}), та джерело світла "Globar"

Так, різні групи швидкостей молекул мають різні доплерівські зсуви (див., наприклад, [8]). Відповідна доплерівська ширина лінії оцінюється для доного типу молекул при заданих умовах порядку 0.01 cm^{-1} , що є щонайменше на порядок менше за відстань між видимими піками. Скануючий промінь при багаторазовому проходженні резонує з відповідною доплерівською групою та може підсилюватись

при вимушеній емісії. При цьому, проходження променя у протилежних напрямках може викликати певний тип розщеплення, так звані лембівські щілини (див., наприклад, [9]) Проте, інтенсивність вимушеної емісії пропорційна інтенсивності променя для некогерентного збудження, і тому, для випадку відносно низької інтенсивності інфрачервоного променя, не може бути основною причиною спостережуваного перевипромінювання.

Взаємодія між різними доплерівськими групами та протилежно напрямленими променями у багатопрхідній комірці Уайта при певній когерентності може спричинити підсилення прохідного променя при реемісії на частоті з відповідним доплерівським зсувом.

Таким чином, при наявності когерентності між молекулярними збудженими станами та електромагнітним полем ймовірність переходу з перевипромінюванням може бути пропорційна концентрації атомів. Такий механізм може мати природу Діке надвипромінювання (див., наприклад, [2]) та характеризуватись шириною лінії пропорційною концентрації молекул і порівняно вищою за поглинання висотою піків. Останнє не є вираженням ефектом на продемонстрованих графіках.

Крім цього, можуть бути і інші квантово-оптичні механізми перевипромінювання, основані на колективних когерентних явищах у взаємодіючому з полем середовищі. Наприклад, як було показано в роботах [10] – [12], система атомів (чи молекул), взаємодіюча з двома протилежно напрямленими променями з частотами близькими до резонансної, при концентраціях порядку $0.5 - 1 \times 10^3$ атомів у кубічній довжині хвилі резонансного переходу, можуть формувати певні особливі когерентні стани системи, що відзначаються високою нестабільністю при відносно невеликій зміні концентрації газу. Останнє, як продемонстровано у роботі [12], для концентрацій атомів порядку $0.5 \times 10^3 - 1 \times 10^3$ атомів у кубічній довжині хвилі резонансного переходу, може призводити до появи серії ліній при достатній відносній зміні концентрації. Така сама область значень концентрацій молекул у парі HF відповідає тискові порядку 1 Па та довжині хвилі резонансного поглинання з частотою $\nu_1 \approx 4001 \text{ см}^{-1}$. Тоді ймовірність флуктуацій густини є відносно висока для достатньо малої

концентрації частинок та (або) різної кількості частинок, що приймають участь у різних доплерівських групах.

Висновки

Отже, при певних умовах у багатопрхідній оптичній комірці Уайта коливально-обертальний спектр пару фтороводню (формула HF) може виявляти особливості, що можуть бути спричинені когерентними колективними явищами при заданому резонансному коливально-обертальному переході та мати квантово-оптичну природу. Зокрема, система молекул, взаємодіюча з двома протилежно напрямленими променями з частотами близькими до резонансної, при концентраціях порядку $0.5 \times 10^3 - 1 \times 10^3$ атомів у кубічній довжині хвилі резонансного переходу, може перебувати у когерентних станах, ймовірність яких визначається певною, нелінійною відносно концентрації, величиною міжмолекулярної взаємодії. При цьому, тип міжмолекулярної взаємодії у даному випадку визначає, так звана, квантово-оптична диполь-дипольна взаємодія, спричинена обміном квантами поля (віртуальними фотонами) між молекулами. Величина такої багаточастинкової (колективної) взаємодії має сильно нелінійний характер відносно концентрації. Тому згадані специфічні колективні когерентні стани відзначаються високою нестабільністю при відносно невеликій зміні концентрації газу. Останнє, як продемонстровано у роботі [6], для концентрацій атомів порядку $0.5 \times 10^3 - 1 \times 10^3$ атомів у кубічній довжині хвилі резонансного переходу, може призводити до появи серії ліній при достатній відносній зміні концентрації. Таким чином, була спостережена група відносно щільно розашованих ліній поглинання та перевипромінювання.

Подяка

Автор роботи виражає особливу вдячність групі наукових дослідників під проводом проф. Дж. Бевана, Техаський ЕйЕм Університет, США, (2009 – 2011 pp.), за консультативну, фінансову, та інструментальну підтримку, надання доступу до спектроскопічної лабораторії.

Список використаних джерел

1. Денлі Б. Г. Настройка частот та ефективність підсилення високопотужних лазерів у далекій інфрачервоній області. Інфрачервоні та міліметрові хвилі Т.12: Електромагнітні хвилі у середовищі, ч. 2. Електромагнітні хвилі у середовищі, ч. 2, edited by відредагована К. Дж. Баттон / Б. Г. Денлі. – Orlando, Florida: Academic Press, 1984. – 35 с.
2. Шкрібановіч Н. et. al. Observation of Dicke Superradiance in Optically Pumped HF Gas / Н. Шкрібановіч // *Phys. Rev. Lett.* – 1973. – № 30. – С. 309 – 312.
3. Діке Р. Х. Когерентність у невимушених випромінювальних процесах / Р. Х. Діке // *Phys. Rev.* – 1954. – № 93. – С. 99.
4. Боуден С. М. Near-dipole-dipole effects in dense media: generalized Maxwell-Bloch equations / Боуден С. М., Дж. П. Доулінг // *Phys. Rev. A.* – 1993. – № 47. – С. 1247.
5. Манасса Дж. Т. The Dynamical Lorentz Shift in an extended optically dense superradiant amplifier / Дж. Т. Манасса, Б. Гросс // *Opt. Express.* – 1997. – 1(6), С. 1412 – 1420.
6. Флайшхауер М. Radiative atom-atom interactions in optically dense media: Quantum corrections to the Lorentz-Lorenz formula / М. Флайшхауер, Єлін С. Ф. // *Phys. Rev. A.* – 1999. – 59(3), С. 2427 – 2432.
7. Кеавені Дж. Cooperative lamb shift in an atomic vapor layer of nanometer thickness / Дж. Кеавені // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – № 108. – С. 173601.
8. Демтрьодер В. *Laser Spectroscopy. Vol. 1: Basic Principles. 5th edition.* / В. Демтрьодер / Berlin Heidelberg: Springer-Verlag. – 2014ю – С. 71 – 73.
9. Холлас Дж. М. *Modern Spectroscopy, 4th ed.* / Дж. М. Холлас. – The Atrium, Southern Gate, Chichester, England: John Wiley and Sons Ltd., 2004. – С. 34 – 38.
10. Сіжук А. С. Квантовооптичне формулювання поняття коефіцієнта поглинання / А. С. Сіжук, С. М. Єжов. // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: фізико-математичні науки. – 2016. – №1. – С. 193 – 197.
11. Сіжук А. С. Застосування узагальненого коефіцієнта поглинання для підрахунку ефектів віддачі та Доплера / А. С. Сіжук, С. М. Єжов. // Український фізичний журнал. – 2017. – Т. 62. – №. 4. – С. 299 – 305.
12. Сіжук А. С. Поглинальні властивості газів з квантово-оптичним механізмом взаємодії / А. С. Сіжук // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: [Радіофізика та електроніка](#). – 2016. – № 1. (у друці).

References

1. DANLY, B. G. et al. (1984) *Frequency tuning and efficiency enhancement of high-power far-infrared lasers. Infrared and Millimeter Waves V12: Electromagnetic Waves in Matter*, Part 2, edited by Kenneth J. Button B. G. Danly, et al. Orlando, Florida: Academic Press, Inc.
2. SKRIBANOWITZ, N. et. al. (1973) Observation of Dicke Superradiance in Optically Pumped HF Gas. *Phys. Rev. Lett.* 30, p. 309 – 312.
3. DICKE, R. H. (1954) Coherence in spontaneous radiation processes. *Phys. Rev.* 93. p. 99 – 104.
4. BOWDEN, C. M. AND DOWLING, J. P. (1993) Near-dipole-dipole effects in dense media: generalized Maxwell-Bloch equations. *Phys. Rev. A* 47. p. 1247 -1251.
5. MANASSAH, J. T. GROSS, B. (1997) The Dynamical Lorentz Shift in an extended optically dense superradiant amplifier. *Opt. Express.* 1(6). P. 1412 – 1413.
6. FLEISCHHAUER, M. AND YELIN, S. F. (1999) Radiative atom-atom interactions in optically dense media: Quantum corrections to the Lorentz-Lorenz formula. *Phys. Rev. A.* 59(3), p. 2427 - 2432.
7. KEAVENEY, J et al. (2012) Cooperative lamb shift in an atomic vapor layer of nanometer thickness. *Phys. Rev. Lett.* 108. p. 173601.
8. DEMTÖDER, W. (2014). *Laser Spectroscopy. Vol. 1: Basic Principles.* 5th edition. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag. P. 71 – 73.
9. HOLLAS, J. M. (2004) *Modern Spectroscopy, 4th ed.* The Atrium, Southern Gate, Chichester, England: John Wiley and Sons Ltd. P. 34 – 38.
10. SIZHUK, A. S., YEZHOV, S. M. (2016) The quantum optical formulation of absorption coefficient. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series Physics & Mathematics.* (1). P. 193 - 197.
11. SIZHUK, A. YEZHOV, S. (2017) Application of the generalized absorptance for counting the recoil and Doppler effects. *Ukrainian Journal of Physics.* V. 62, N. 4, P. 299 - 305.
12. SIZHUK, A. S. (2016) Absorption properties of atoms with the quantum optical interaction. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series Radiophysics & Electronics.* (1) (in press).

Надійшла у редколегію 17.08.17

Підписано до друку _____. Формат _____. Друк. офс.
Папір офс. № _____. Друк. арк. _____. Тираж _____. Зам. _____.
Друкарня _____.