

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО
УНІВЕРСИТЕТУ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

СЕРІЯ ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК №1 2018

**Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка,
випуск №1, 2018,**

Серія фізико-математичні науки

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

Журнал “Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки” включено до переліку фахових видань ВАК України, 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:

Козаченко Юрій Васильович, д.ф.-м.н., проф., **головний редактор**;
Arturs Medvids, Dr. Phys. (habil.), Prof., Riga Technical University, Riga, Latvia;
Bavula Vladimir, Prof., University of Sheffield, Great Britain;
Beghin Luisa, Prof., Sapienza Università di Roma, Italy;
Futorny Vyacheslav, Prof., Universidade de São Paulo, Brazil;
Giuliano Rita, Prof., Università di Pisa, Italy;
Leonenko Nikolay, Prof., Cardiff University, Great Britain;
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;
Olenko Andriy, Prof., La Trobe University, Australia;
Orsingher Enzo, Prof., Sapienza University of Rome, Italy;
Pogany Tibor, Prof., University of Rijeka, Croatia;
Sergei Gorlatch, Dr. Sci. (habil.), Prof., University of Muenster, Muenster, Germany;
Sergey Trofimchuk, Prof., Universidadde Talca, Instituto de Matematica y Fisica, Talca, Chile;
Silvestrov Dmitrii, Prof., Stockholms universitet, Sweden;
Sottinen Tommi, Prof., University of Vaasa, Finland;
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;
Ostrovsky Eugene, Prof., Bar- Ilan University, Israel;
Volodin Andrei, Prof., University of Regina, Canada;
Акіменко Віталій Володимирович, д.т.н., проф.;
Анісімов Ігор Олексійович, д.ф.-м.н., проф.;
Анісімов Анатолій Васильович, чл.-кор. НАН України, 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.;
Курченко Олександр Олексійович, 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.;
Майборода Ростислав Євгенович, д.ф.-м.н., проф.;
Моклячук Михайло Павлович, д.ф.-м.н., проф.;
Пашко Анатолій Олексійович, д.ф.-м.н., проф.;
Перестюк Микола Олексійович, акад. НАН України, д.ф.-м.н., проф.;
Петравчук Анатолій Петрович, д.ф.-м.н., проф.;
Погорілий Сергій Дем'янович, д.т.н., проф.;

Розора Ірина Василівна, к.ф.-м.н., доц.;
Савенков Сергій Миколайович, д.ф.-м.н., доц.;
Скришевський Валерій Антонович, д.ф.-м.н., проф.;
Сливка-Тилищак Ганна Іванівна, д.ф.-м.н., проф.;
Хусаїнов Денис Ях'євич, д.ф.-м.н., проф.;

Редакційний відділ:

Отто Георгій Костянтинович, **відповідальний секретар**;
Безущак Оксана Омелянівна, bezusch@univ.kiev.ua;
Стукаленко Вікторія Віталіївна, stu@univ.kiev.ua;
Родіонова Тетяна Василівна, rodty@univ.kiev.ua;
П'ятецька Олена Василівна, visnyk_phys-math@ukr.net;
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

Безущак Д.І., Ганюшкін О.Г. Напівгрупи перетворень, що зберігають відношення еквівалентності	10
Дуденко М.А. Листково сконструйовані уніциклічні графи	14

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Коновалюк Т.П., Краснопольська Т.С., Печук Є.Д., Соболь Т.В. Внутрішня взаємодія як збуджувач хаосу в серцево-респіраторній системі	22
Лагода О.А., Чайковський А.В. Повільно зростаючі розв'язки лінійного різницевого рівняння загального вигляду на напівосі з початковими умовами	26
Ловейкін Ю.В., Сукретна А.В. Аналіз та оптимізація коливних процесів у двомасовій системі	30
Остос О.Х. Термомеханічна задача про коливання в'язкопружного гумоподібного стержня при кінематичному навантаженні	34
Петрова Т.О. Один контрприклад для q -опуклого наближення функцій, що мають дробову похідну, при $r \in (3,4)$ і $q = 3$	38
Троценко Я. П. Особливості потоку рідини крізь циліндричні порожнини	42

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Алієв Н.А., Ібрагімов Н.С., Маммадзада А.М Розв'язок задачі Коші та крайової задачі для рівняння третього порядку з дискретними адитивно-мультиплікативно-поверативними похідними	50
Гусейнзаде Ш.С. Модель автоматизації адаптивного керування на мережах Петрі	55
Пашко А.О., Розора І.В. Аналіз точності моделювання дробового броунівського руху в рівномірній метриці	60
Усар І.Я., Макушенко І.А., Лукович О.В. Про один підхід до аналізу систем з повторними викликами і чергою	66

РАДІОФІЗИКА

Даник А.Ю. Проблема впливу розсіяного випромінювання у рентгенівській діагностиці	72
---	----

СУЧАСНА ФІЗИКА

Бацак Б.В., Забашта Ю.Ф., Свечнікова О.С. Відбиті хвилі та кровоток у судинах	86
Вербінська Г.М., Вергун Л.Ю., Британ А.В. Експериментальна методика для дослідження кінетики формування гідрогелю желатину	90
Вергун Л.Ю., Свечнікова О.С., Бобровнік С.Р. Методика обробки експериментальних даних при дослідженні структури епітаксialного шару	94

Гребньов О.А., Мацуй Л.Ю, Сисоєв В.М. Діелектричні властивості водних сумішей системи наноцелюлоза-PNIPAM	98
Грідякіна О.В., Білоус О.І., Свечнікова О.С. Структура мезофаз і мезоморфних стекол металалканоатів	102
Дорошенко І.Ю., Васильєва А.О., Шакула Г.Є., Погорелов В.Є. Конформаційний аналіз димерів етанолу в матричній ізоляції	108
Кравець В. Г., Ляшенко І. О., Поперенко Л. В., Щербаков А. О. Підсилення плазмонного резонансу в метало-діелектричних гетероструктурах з поверхневим шаром графена	112
Терентьєва Ю.Г. Сніцєрова О.М. Високотемпературна флуоресценція аденозину	118
Ямпольський А.Л., Макаренко О.В., Шарапа А.І. Фотодіодний приймальний модуль з цифровим перемикуванням діапазонів	120

CONTENTS

ALGEBRA, GEOMETRY AND PROBABILITY THEORY

Bezushchak D.I., Ganyushkin O.G. Semigroups of transformations preserving equivalence relation	10
Dudenko M.A. Leaf-constructed unicyclic graphs	14

DIFFERENTIAL EQUATIONS, MATHEMATICAL PHYSICS AND MECHANICS

Konovalyuk T.P., Krasnopol'skaya T.S., Pechuk E.D., Sobol T.V. Internal interaction as chaos trigger in cardiorespiratory system	22
Lahoda O.A., Chaikovskiy A.V. Slowly growing solutions of general linear difference equation on a half-axis with initial conditions	26
Loveikin Y.V., Sukretna A.V. Analysis and optimization of oscillating processes in two-mass system	30
Ostos O.J. Thermomechanical problem on vibration of a viscoelastic rubberlike rod by kinematic load	34
Petrova T. O. One counterexample for q -convex approximation of function with fractional derivatives, $r \in (3,4)$ and $q = 3$	38
Trotsenko Y.P. Properties of the fluid flow through cylindrical cavities	42

COMPUTER SCIENCES AND INFORMATICS

Aliyev N.A., Ibrahimov N.S., Mammadzada A.M. Solution of Cauchy and boundary problems for the third compilation discrete additive-multiplicative-powerative derivative equation	50
Huseynzade Sh.S. Automation Model of the Adaptive Control on Petri nets	55
Pashko A.O. Rozora I.V., Analysis of Accuracy for Simulation of the Fractional Brownian Motion in uniform metrics	60
Usar I.Ya., Makushenko I.A., Lukovych O.V. On an approach to analyze retrieval systems with queue	66

RADIOPHYSICS

Danyk A.Y. The problem of scattered radiation in X-ray imaging	72
--	----

MODERN PHYSICS

Batsak B.V., Zabashta Yu.F., Svechnikova O.S. Reflected waves and blood flow in vessels	86
Verbinska G.M., Vergun L.Yu., Brytan A.V. Experimental method for studying the kinetics of formation of gelatin hydrogel	90
Vergun L.Yu., Svechnikova O.S., Bobrovnik S.R. Method of processing experimental data for researching of the structure of the epitaxial layer	94
Hrebunov O.A., Matzui L.Yu., Sysoev V.M. Dielectric properties of aqueous suspensions of nanocellulose-PNIPAM system	98

Gridyakina O.V., Bilous O.I., Svechnikova O.S. Structure of mesophases and mesomorphic glasses of metalalkanoates	102
Doroshenko Yu., Vasylieva A.O., Shakula G.Ye., Pogorelov V.Ye. Conformational analysis of ethanol dimers in matrix isolation	108
Kravets V.G., Liashenko I.O., Poperenko L.V., Shcherbakov A.O. Amplification of plasmon resonance in metal-dielectric hetero-structures with graphene surface	112
Terentyeva Yu.G. Snitserova O.M. High-temperature fluorescence of adenosine	118
Yampolskiy A.L., Makarenko O.V., Sharapa A.I. Photodiode receiver module with digital gain control	120

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

УДК 519.17

Дмитро І. Безущак¹, магістр
Олександр Г. Ганюшкін², к.ф.-м.н., доцент

Напівгрупи перетворень, що зберігають відношення еквівалентності

^{1,2}Київський національний університет
імені Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Воло-
димирська, 64,
e-mail: ¹bezushchak@gmail.com
e-mail: ²ganiyshk@univ.kiev.ua

Dmytro I. Bezushchak¹, Master-student
Oleksandr G. Ganyushkin², Ph.D., Associate
Professor

Semigroups of transformations preserving equivalence relation

^{1,2}Taras Shevchenko National University of
Kyiv, 01033, Kyiv, 64 Volodymyrska str.,
e-mail: ¹bezushchak@gmail.com,
e-mail: ²ganiyshk@univ.kiev.ua

Кажуть, що перетворення α із напівгрупи (S, M) перетворень (можливо, часткових) мно-
жини M зберігає відношення еквівалентності ρ на M , якщо з того, що пара (x, y) належить
 ρ випливає, що пара $(\alpha(x), \alpha(y))$ також належить ρ для довільних x, y з області визначення
відображення α . Множина $S^{(\rho)}$ усіх перетворень із S , які зберігають дане відношення ρ , утво-
рює піднапівгрупу напівгрупи (S, M) . У роботі вивчаються властивості $S^{(\rho)}$ у випадку, коли S
є однією з класичних скінченних напівгруп перетворень $\mathcal{T}_n, \mathcal{PT}_n, \mathcal{IS}_n$.

Ключові слова: відношення еквівалентності, напівгрупа перетворень, класичні скінченні на-
півгрупи перетворень.

It is said, that a transformation α from the semigroup (S, M) of transformations (that may be parti-
ally defined) of a set M preserves an equivalence relation ρ on M , if (x, y) from ρ implies $(\alpha(x), \alpha(y))$
from ρ for every x, y from the domain of α . The set $S^{(\rho)}$ of all transformations from S , that preserve
the given relation ρ , creates a subsemigroup of the semigroup (S, M) . In the paper properties of $S^{(\rho)}$ are
studied for the case, when S is a classic finite semigroups of transformations. For equivalence relation
 ρ on the set $N = \{1, \dots, n\}$ and for classic semigroups of transformations of the set N , namely for the
symmetric semigroup $\mathcal{T}_n$ of all transformations, for the semigroup $\mathcal{PT}_n$ of all partial transformations
and for the inverse symmetric semigroup $\mathcal{IS}_n$ of all partially injective transformations, the order of
semigroup $S^{(\rho)}$, amount of idempotents that it has, a structure and an order of it's semigroup $\bigcap_{\rho} S^{(\rho)}$
will be calculated.

Key Words: equivalence relation, semigroup of transformations, classic finite semigroups of transformati-
ons.

Communicated by Prof. Kirichenko V.V.

Introduction

Let (S, M) be the semigroup of transformati-
ons of a set M , that may be partially defi-
ned (meaning that S is a subsemigroup of
the semigroup $\mathcal{PT}(M)$ of all partially defined
transformations of the set M). The transformati-
on $\alpha \in S$ is said to be *preserving a relati-
on* ρ on the set M , if $(x, y) \in \rho$ implies that
 $(\alpha(x), \alpha(y)) \in \rho$ for every $x, y \in \text{dom } \alpha$. The set
of all the transformations from S , that preserve
the given relation ρ , creates a subsemigroup of a
semigroup (S, M) , that will be denoted by $S^{(\rho)}$.

It is necessary to mention, that in corner si-
tuations, when ρ coincides with the equality rela-
tion or with the total relation $M \times M$ all of the

transformations of the semigroup (S, M) preserve
this relation.

Semigroups $S^{(\rho)}$, where ρ is a relation of a
partial or a linear order on M have been studi-
ed for a long time (see [1] and the provided bibli-
ography there). But during the last years the case,
when ρ is an equivalence relation, had grabbed si-
gnificant attention. First of all for such semigroups
the conditions of regularity of elements and Green
relations are studied (for examples [2]). Someti-
mes the relations from $S^{(\rho)}$ are being affected by
several restrictions. For instance it may be requi-
red the preservation of a relation of a partial or a
linear order, or a cross-section of a set of classes
of an equivalence ([3]), or instead of the implicati-

on $(x, y) \in \rho \Rightarrow (\alpha(x), \alpha(y)) \in \rho$ the equivalence is required ([4]). Also different subsemigroups classes of the semigroup $S^{(\rho)}$ are studied ([3], [5]).

For equivalence relation ρ on the set $\mathbf{N} = \{1, \dots, n\}$ and for classic semigroups of transformations of the set $\mathbf{N}$, namely for the symmetric semigroup $\mathcal{T}_n$ of all transformations, for the semigroup $\mathcal{PT}_n$ of all partial transformations and for the inverse symmetric semigroup $\mathcal{IS}_n$ of all partially injective transformations, the order of semigroup $S^{(\rho)}$, amount of idempotents that it has, a structure and an order of it's semigroup $\bigcap_{\rho} S^{(\rho)}$ will be calculated. The terminology and notations from [1] will be used.

Classic finite semigroups of transformations

Let the semigroup (S, M) is either symmetric semigroup $\mathcal{T}_n$ of all transformations of the set $\mathbf{N} = \{1, \dots, n\}$, or the semigroup $\mathcal{PT}_n$ of all partial transformations $\mathbf{N}$, or inverse symmetric semigroup $\mathcal{IS}_n$ of all partially injective transformations of the set $\mathbf{N}$.

It is important to notice that $\mathcal{T}_n$ and $\mathcal{IS}_n$ are subsemigroups of $\mathcal{PT}_n$.

Theorem 1. Let classes of equivalence $M_1, M_2, \dots, M_k$ of a relation ρ on the set $\mathbf{N}$ have corresponding orders $n_1, n_2, \dots, n_k$, where $n_1 + n_2 + \dots + n_k = n$.

- a) Semigroup $\mathcal{T}_n^{(\rho)}$ is of order $(n_1^{n_1} + n_2^{n_2} + \dots + n_k^{n_k})(n_1^{n_2} + n_2^{n_2} + \dots + n_k^{n_2}) \dots (n_1^{n_k} + n_2^{n_k} + \dots + n_k^{n_k})$.
b) Semigroup $\mathcal{PT}_n^{(\rho)}$ is of order $((n_1 + 1)^{n_1} + \dots + (n_k + 1)^{n_1 + (1-k)}) \dots ((n_1 + 1)^{n_k} + \dots + (n_k + 1)^{n_k + (1-k)})$.

Proof. a) Let $\alpha \in \mathcal{T}_n^{(\rho)}$. Then $\alpha(M_i)$ belongs to some equivalence class M_j . The mapping $M_i \rightarrow M_j$ can be provided in $n_j^{n_i}$ possible ways. That's why on the equivalence class M_i the transformation α can be provided in $n_1^{n_1} + n_2^{n_1} + \dots + n_k^{n_1}$ possible ways. However, on different classes those transformations α can be independently defined, this proofs the proposition a).

b) Comparing to the previous part, for a representation $M_i \rightarrow M_j$ an image of every element $x \in M_i$ can be identified in $n_j + 1$ ways, because in the point x the mapping can be not identified. But summing up by all of the equivalence classes $M_1, \dots, M_k$ the mapping, that is not identified in each point of class M_i , will be counted k times, each time for each class. That is

why the transformation $\alpha \in \mathcal{PT}_n^{(\rho)}$ on the equivalence class M_i can be provided in $(n_1 + 1)^{n_i} + \dots + (n_k + 1)^{n_i} + (1 - k)$ different ways. To end the proof, it is important to mention again, that on the different classes, those transformations α can be defined independently. $\square$

Let on a set M by identified the equivalence relation ρ_1 , equivalence classes of which are $M_1, \dots, M_p$ of orders $m_1, \dots, m_p$, correspondingly, and on a set N the equivalence relation ρ_2 , equivalence classes of which are $N_1, \dots, N_q$ of orders $n_1, \dots, n_q$ correspondingly. Let us notice, that M and N are disjoint union of $M = M_1 \dot{\cup} M_2 \dot{\cup} \dots \dot{\cup} M_p$ and $N = N_1 \dot{\cup} N_2 \dot{\cup} \dots \dot{\cup} N_q$ correspondingly. The amount of $f(m_1, \dots, m_p; n_1, \dots, n_q)$ of partial injective representations $\alpha : M \rightarrow N$, that preserve these relations, will be counted, together with the fact, that they satisfy the condition (through $\text{dom } \alpha$ the domain of α is denoted)

$$x\rho_1 y \Rightarrow \alpha(x)\rho_2\alpha(y) \quad \text{for each } x, y \in \text{dom } \alpha. \quad (1)$$

Proposition 1. a) $f(m; n_1, \dots, n_q) = 1 + \sum_{k=1}^m \binom{m}{k} \sum_{i=1}^q \binom{n_i}{k} k!$,
b) $f(m_1, \dots, m_p; n) = \sum_{k=0}^{m_1 + \dots + m_p} \binom{m_1 + \dots + m_p}{k} \binom{n}{k} k!$.

Proof. a) The nowhere defined mapping satisfies the condition (1). The other mappings, for which $|\text{dom } \alpha| = k > 0$, can be obtained in the following way: first of all, the subset, that consists of k elements is drawn, $A \subseteq M$ (this can be done in $\binom{m}{k}$ ways), than, some class N_i and the next subset, consisting of another k elements are drawn, $B \subseteq N_i$ (this can be done in $\binom{n_i}{k}$ ways). After that, one may construct $k!$ bijective mappings $\alpha : A \rightarrow B$. Obviously, that in such a way all of the partial injective mappings $\alpha : M \rightarrow N$, that satisfy the condition (1), without any repetition are obtained.

b) In this case any injective mapping $\alpha : M \rightarrow N$ satisfies the condition (1). $\square$

Theorem 2. $f(m_1, \dots, m_p; n_1, \dots, n_q) = f(m_1, \dots, m_{p-1}; n_1, \dots, n_q) + \sum_{k=1}^{m_p} \binom{m_p}{k} \sum_{i=1}^q \binom{n_i}{k} f(m_1, \dots, m_{p-1}; n_1, \dots, n_i - k, \dots, n_q) k!$.

Proof. All injective mappings $\alpha : M \rightarrow N$, that satisfy the condition (1), may be distributed into classes depending on the order of a set $\text{dom } \alpha \cap M_p$. The first component corresponds to the case $|\text{dom } \alpha \cap M_p| = 0$. If $|\text{dom } \alpha \cap M_p| = k \geq 1$, so we are to draw k elements in equivalence class M_p

(this can be done in $\binom{m_p}{k}$ ways), afterwards the equivalence class N_i is to be chosen, at which these elements will be mapped, and, finally, in N_i the k images are to be chosen from drawn elements from M_p (this can be done in $\binom{n_i}{k}$ ways). The chosen elements from M_p into the elements from N_i can be mapped in $k!$ ways. The mapping α can be determined on $M \setminus M_p$ in $f(m_1, \dots, m_{p-1}; n_1, \dots, n_i - k, \dots, n_q)$ ways. $\square$

Corollary 1. *If equivalence classes $M_1, \dots, M_k$ of a relation ρ on a set $\mathbf{N}$ are of corresponding orders $n_1, \dots, n_k$, $n_1 + \dots + n_k = n$, so for an order of a semigroup $\mathcal{IS}_n^{(\rho)}$ the recurrent relation takes place: $|\mathcal{IS}_n^{(\rho)}| = f(n_1, \dots, n_{k-1}; n_1, \dots, n_k) +$*

$$\sum_{r=1}^{n_k} \binom{n_k}{r} \sum_{i=1}^k \binom{n_i}{r} f(n_1, \dots, n_{k-1}; n_1, \dots, n_i - r, \dots, n_k) r!.$$

Theorem 3. *Let equivalence classes $M_1, \dots, M_k$ of the equivalence relation ρ be of orders $n_1, \dots, n_k$, where $n_1 + \dots + n_k = n$.*

a) *Semigroup $\mathcal{IS}_n^{(\rho)}$ contains all of idempotents from $\mathcal{IS}_n$. In particular, it has 2^n idempotents.*

b) *The amount of idempotents in semigroup $\mathcal{T}_n^{(\rho)}$ is equal to $\sum_{\substack{1 \leq m_1 + \dots + m_k \leq n \\ m_1 \leq n_1, \dots, m_k \leq n_k}} \prod_{i=1}^k A_i \binom{n_i}{m_i}$, where*

$$A_i = \begin{cases} \sum_{j \neq i} m_j^{n_i}, & \text{if } m_i = 0; \\ m_i^{n_i - m_i}, & \text{if } m_i \neq 0. \end{cases}$$

c) *The amount of idempotents in semigroup $\mathcal{PT}_n^{(\rho)}$ is equal to $\sum_{\substack{0 \leq m_1 + \dots + m_k \leq n \\ m_1 \leq n_1, \dots, m_k \leq n_k}} \prod_{i=1}^k B_i \binom{n_i}{m_i}$, where*

$$B_i = \begin{cases} \sum_{j \neq i} (m_j + 1)^{n_i}, & \text{if } m_i = 0; \\ (m_i + 1)^{n_i - m_i}, & \text{if } m_i \neq 0. \end{cases}$$

Proof. The transformation $\alpha \in \mathcal{PT}_n$ will be an idempotent if and only if, when it operates identically on its range. ([1], Th. 2.7.2). It is obvious, that $S^{(\rho)}$ can not contain idempotents, that are not idempotents of a semigroup S .

a) However every idempotent from $\mathcal{IS}_n$ is an identical transformation of its domain, so it preserves all of the relations on $\mathbf{N}$, and, subsequently, belongs to every $\mathcal{IS}_n^{(\rho)}$. $\mathcal{IS}_n$ contains 2^n idempotents ([1], Cor. 2.7.3).

b) Let us count the amount of idempotents $\alpha \in \mathcal{T}_n$, for which $|\text{dom } \alpha \cap M_i| = m_i$, $i = 1, \dots, k$. In the equivalence class M_i one may chose m_i elements in $\binom{n_i}{m_i}$ ways. If $m_i \neq 0$, so

other elements from M_i can be only mapped into the set $\text{dom } \alpha \cap M_i$. This can be done in $m_i^{n_i - m_i}$ ways. If $m_i = 0$, then elements from M_i can be mapped into any set out of $\text{dom } \alpha \cap M_j$, $j \neq i$. This can be done in $\sum_{j \neq i} m_j^{n_i}$ ways.

To finish the proof, it is necessary to mention, that the value of an idempotent α on different equivalence classes M_i is chosen independently, and one may sum up by all of the possible sets $(\text{dom } \alpha \cap M_1, \dots, \text{dom } \alpha \cap M_k)$.

c) The proof is similar to the previous one, but transferring from the $\mathcal{T}_n$ to $\mathcal{PT}_n$ it is crucial to account for several additional issues. First, the idempotent in $\mathcal{PT}_n$ can be identified nowhere, that is why the sum $m_1 + \dots + m_k$ can be equal to 0. Second, in $x \notin \text{dom } \alpha$ α can be unidentified, that is why possible values for $\alpha(x)$ are more by one, comparing to the case $\mathcal{T}_n$. $\square$

If $|M| \leq 2$, then every equivalence relation on M coincides with the equality relation or with the total relation. So in such a case $S^{(\rho)} = S$ always holds. By $\text{Eq}(M)$ we will be denoting the set of all equivalence relations on a set M .

Theorem 4. *Let $n > 2$.*

a) *The element $\alpha \in \mathcal{IS}_n$ belongs to a semigroup $S_1 = \bigcap_{\rho \in \text{Eq}(\mathbf{N})} \mathcal{IS}_n^{(\rho)}$ if and only if, when either*

$\text{rank } \alpha \leq 1$, or α is an idempotent, or α is a group element of order 2. In particular, $|S_1| = 2^n + \frac{3n(n-1)}{2}$.

b) *The element $\alpha \in \mathcal{T}_n$ belongs to a semigroup $S_2 = \bigcap_{\rho \in \text{Eq}(\mathbf{N})} \mathcal{T}_n^{(\rho)}$ if and only if either $\text{rank } \alpha = 1$,*

or α is a unit element ε of a semigroup $\mathcal{T}_n$. In particular, $|S_2| = n + 1$.

c) $S_3 = \bigcap_{\rho \in \text{Eq}(\mathbf{N})} \mathcal{PT}_n^{(\rho)} = S_1 \cup \{\alpha \in \mathcal{PT}_n \mid \text{rank } \alpha = 1\}$. In particular, $|S_3| = 2^n(n+1) + \frac{n(5n-1)}{2}$.

Proof. It is important to notice, that in each semigroup of transformations S of elements of a rank ≤ 1 preserve all equivalence relations, so they belong to each semigroup $S^{(\rho)}$. That is why it is important only to verify which elements of rank ≥ 2 belong to $\bigcap_{\rho} S^{(\rho)}$.

a) In $\mathcal{IS}_n$ each idempotent is identical transformation of its domain, so preserves equivalence relation and belong to S_1 . If α is nonidempotent group element of rank 2, then $\text{dom } \alpha = \text{im } \alpha = \{a, b\}$ and $\alpha(a) = b$, $\alpha(b) = a$. No matter

whether a and b belong to same equivalence class of relation ρ , or different ones, α preserves this relation and therefore belongs to S_1 .

Let now element α of rank 2 be not a group element. Then $\text{dom } \alpha \neq \text{im } \alpha$. It implies that α does not preserve equivalence relation, which has one equivalence class $\text{dom } \alpha$, and the other classes consisting of one element. Hence $\alpha \notin S_1$.

Eventually, let $\text{rank } \alpha > 2$ and α be not an idempotent. Then there exists such $a \in \text{dom } \alpha$, that $\alpha(a) \neq a$, and $b \in \text{dom } \alpha$, that $\alpha(b) \neq a$. Therefore α does not preserve equivalence relation, with one equivalence class $\{a, b\}$, and the other classes consisting of one element. Hence, $\alpha \notin S_1$.

$\mathcal{IS}_n$ contains 2^n idempotents, $n(n-1)$ non-idempotent elements of rank 1 and $\frac{n(n-1)}{2}$ non-idempotent group elements of rank 2. Therefore $|S_1| = 2^n + n(n-1) + \frac{n(n-1)}{2} = 2^n + \frac{3n(n-1)}{2}$.

b) Primarily we will be observing the case, when $\alpha \in \mathcal{T}_n$ is different from ε element of a rank > 2 . Then there exists such a , that $\alpha(a) \neq a$, and the condition $\text{rank } \alpha > 2$ implies that there exists such b , that $\alpha(b) \notin \{a, \alpha(a)\}$. But then α does not preserve equivalence relation, which has one equivalence class $\{a, b\}$, and the other classes

consisting of one element. Hence $\alpha \notin S_1$.

Let $\text{rank } \alpha = 2$, the image of α is $\{a, b\}$ and $\alpha(a_1) = a$, $\alpha(b_1) = b$. While $n > 2$, so without losing the generality we can consider that there exists such $a_2 \neq a_1$, that $\alpha(a_2) = a$. We will be denoting by ρ_i the equivalence relation, which has one equivalence class $\{a_i, b_1\}$, $i = 1, 2$, and the other classes consisting of one element. Hence, $\alpha(\{a_i, b_1\}) = \{a, b\}$, then α does not preserve at least one of these relations. So, $\alpha \notin S_2$.

So S_2 contains only elements of rank 1 and unit element ε from the semigroup $\mathcal{T}_n$. Then in $\mathcal{T}_n$ there are n elements of rank 1, so $|S_2| = n + 1$.

c) It is obvious, that $S_3 \supseteq S_1$. By considerations, similar to the part b), it can be proved that elements of a rank > 1 from $\mathcal{PT}_n \setminus \mathcal{IS}_n$ do not belong to the semigroup S_3 . This proves the first part of the proposition c). It is left to count the amount of elements of rank 1 from $\mathcal{PT}_n$, that do not belong to $\mathcal{IS}_n$. However, every transformation of rank 1 is a mapping of some nonempty subset from $\mathbb{N}$ into one of elements from $\mathbb{N}$, so the amount of these transformations of rank 1 will be $n(2^n - n - 1)$. Therefore $|S_3| = |S_1| + n(2^n - n - 1) = 2^n(n + 1) + \frac{n(5n-1)}{2}$. $\square$

Список використаних джерел

1. Ganyushkin O. Classical Finite Transformation Semigroups. An Introduction / Ganyushkin O., Mazorchuk V. / Algebra and Applications Vol. 9. – Springer-Verlag, London. – 2009. – 340p.
2. Sun L. Green's Relations on Semigroups of Transformations Preserving Two Equivalence Relations / Sun L., Pei H. // Journal of Mathematical Research & Exposition. – 29, No.3 (2009). – P.415–422.
3. Araújo J. Semigroups of Transformations Preserving an Equivalence Relation and a Cross-Section / Araújo J., Konieczny J. // Communications in Algebra. – 32 (2004). – P.1917–1935.
4. Sun L. A partial order on transformation semigroups that preserve double direction equivalence relation / Sun L. // Journal of Algebra and Its Applications, 12(08). – July 2013.
5. Pei H. Abundant Semigroups of Transformations Preserving an Equivalence Relation / Pei H., Zhou H. // Algebra Colloquium – 2011. – 18, No.01. – P.77–82.

References

1. GANYUSHKIN, O., MAZORCHUK, V. (2009) "Classical Finite Transformation Semigroups. An Introduction", Algebra and Applications Vol. 9, Springer-Verlag, London, 340 p.
2. SUN, L., PEI, H. (2009) "Green's Relations on Semigroups of Transformations Preserving Two Equivalence Relations", Journal of Mathematical Research & Exposition 29, No.3, pp. 415–422.
3. ARAÚJO, J., KONIECZNY, J. (2004) "Semigroups of Transformations Preserving an Equivalence Relation and a Cross-Section", Communications in Algebra, 32, pp. 1917–1935.
4. SUN, L. (2013) "A partial order on transformation semigroups that preserve double direction equivalence relation", Journal of Algebra and Its Applications 12 No.8.
5. PEI, H., ZHOU, H. (2011) "Abundant Semigroups of Transformations Preserving an Equivalence Relation", Algebra Colloquium 18, No.01, pp. 77–82.

Received: 11.06.2017

УДК 519.17

М.А. Дуденко

Листково сконструйовані уніциклічні графи

Національний університет "Києво-
Могилянська академія", 04655, м. Київ, вул.
Григорія Сковороди, 2.
e-mail: rita.dudenko@gmail.com

M.A. Dudenko

Leaf-constructed unicyclic graphs

National University of Kyiv-Mohyla
Academy, 04655, Kyiv, 2 Scovoroda st.
e-mail: rita.dudenko@gmail.com

Введено поняття сконструйованого та листково сконструйованого графа за допомогою операції додавання ребра. Залежно від типу з'єднання описано умови, за яких уніциклічний граф G , що є листково сконструйованим з дерева T , має метричну розмірність 2 та 3.

Ключові слова: уніциклічні графи, метрична розмірність, метричний базис, листково сконструйовані графи.

A metric dimension of graph G is the smallest size of a subset $S \in V(G)$ that elements can distinguish each vertex pair of G by the shortest-path distance to some vertex in S . Metric dimension as a graph parameter has numerous applications, such as pharmaceutical chemistry, robot navigation, network discovery and verification, sonar, combinatorial optimization, and was also studied for graphs with high degree of symmetry.

The metric dimension decision problem is among the classical NP-hard problems. But for some families of graphs the metric dimension can be computed in polynomial time. For example, formulas for metric dimension are known for specially structured graphs, such as trees and hypercubes. In the paper we present the concept of constucted and leaf-constructed graph with the help of the operation of an edge addition. Depending on the connection type, we give the conditions under which the unicyclic graph G , which is a leaf-constructed from the tree T , has metric dimension 2 and 3.

Key Words: unicyclic graph, metric dimension, metric basis, leaf-constructed graphs.

Communicated by Prof. Kirichenko V.V.

1 Вступ

Кожна мережа може бути представлена як граф, у якому вершини розглядаються як процесори, а ребра між двома довільними вершинами індукують зв'язки між процесорами. У праці [1] Кулер розглядав навігацію як графічну структуру, в якій робот рухається від вершини до вершини в графовому просторі. В певний момент часу робот може визначити своє місцезнаходження за допомогою вершин-орієнтирів. Якщо робот знає відстань до достатньої кількості орієнтирів, то його розташування визначається однозначно. Постала проблема в знаходженні мінімальної кількості орієнтирів та їх розташуванні в мережі, щоб робот міг завжди визначити своє місцезнаходження. Виявляється, що мінімальна кількість орієнтирів є метричною розмірністю в графовому просторі, поняття якої було введено Харарі та Мелтером в [2]. Слатер у своїй праці [3] описав користь ідеї пошуку метричної розмірності в довготерміно-

вих засобах навігації. Мелтер і Томеску [4] вивчали метричну розмірність для графів-сіток. Відомо, що обчислення метричної розмірності для довільного графа є NP-важкою проблемою [5], тому в багатьох працях досліджується метрична розмірність конкретних конструкцій графів та операцій над ними (декартового, лексикографічного та корона добутоків). Так, у статті [6] виведено оцінку метричної розмірності уніциклічного графа G , отриманого з дерева T за допомогою додавання ребра: $\dim(T) - 2 \leq \dim(G) \leq \dim(T) + 1$. Відповідно, якщо дерево T має метричну розмірність 2, то виконується нерівність $0 \leq \dim(G) \leq 3$. Оскільки, згідно праці [7], метрична розмірність G дорівнює 1 тоді і тільки тоді, коли він є ланцюгом, то матимемо нерівність $2 \leq \dim(G) \leq 3$. У даній статті описано умови, за яких уніциклічний граф G , листково сконструйований з дерева T ($\dim(T) < 3$), має метричну розмірність 2. Відповідно охарактеризовано типи з'єднання, при

яких отриманий граф G має метричну розмірність 3.

2 Основні означення та необхідні твердження

Нехай $G = (V, E)$ — простий, скінченний, неорієнтовний граф з множиною вершин V , $|V| < \infty$ і множиною ребер E .

Означення 2.1. Для $u, v, w \in V$ вершина u розділяє вершини v і w якщо найкоротша відстань між u і v відрізняється від відстані між u та w .

Означення 2.2. Підмножина $M \subset V$ називається метричним генератором графа G якщо будь-яку пару вершин $w, v \in V$ розділяє хоча б одна вершина $u \in M$.

Зауважимо, що множина вершин $V(G)$ є метричним генератором для самої себе.

Означення 2.3. Метричний генератор графа G потужності, найменшої серед усіх можливих, називається метричним базисом, а його потужність — метричною розмірністю графа G і позначається $\dim(G)$.

Як зазначалось в статті [8] очевидним є той факт, що метричний базис існує для будь-якого графа та не є унікальним. Наприклад, для простого ланцюга P_n з початком у вершині u та кінцем у вершині v підмножини $\{u\}$ та $\{v\}$ будуть метричними базисами.

Нагадаємо, що степінь вершини $\deg_G(v)$ — це кількість ребер, що їй інцидентні.

Означення 2.4. Для деякого графа G листком називається вершина, що має степінь 1. Вершина $v \in V$ внутрішньою якщо $\deg_G(v) \geq 3$. Внутрішня вершина v близька до листка l якщо немає внутрішніх вершин в найкоротшому шляху, що з'єднує v і l .

В попередніх статтях ([9], [10], [11]) було введено поняття 1-листокової та 2-листокової вершин. Узагальнимо його для довільної кількості листків.

Означення 2.5. Для деякого натурального n внутрішня вершина називається n -листоковою якщо вона близька рівно до n листків.

Означення 2.6. Простий граф називається уніциклічним, якщо він містить рівно один цикл.

Нехай $G = (V, E)$ — уніциклічний граф та $\hat{V}$ — множина вершин циклу даного графа.

Означення 2.7. Говоритимемо, що вершина $u \in V \setminus \hat{V}$ графа G проектується в вершину $w \in \hat{V}$ якщо для довільної вершини $q \in \hat{V}$ виконується нерівність:

$$d_G(u, w) < d_G(u, q).$$

Вершини степеня 3 циклу, в які проектується вершини степеня 3, що лежать поза циклом, називатимемо основними.

Означення 2.8. [9] Уніциклічний граф G називається парним якщо існує таке натуральне k , для якого $|\hat{V}| = 2k$, і непарним якщо $|\hat{V}| = 2k + 1$.

Означення 2.9. [11] Уніциклічний граф G , що містить лише одну основну вершину, а решта вершин циклу мають степінь 2, називатимемо мінорним графом.

Нехай G — уніциклічний граф і $\hat{G}$ — його підграф, що є ізометричним простому циклу C_k .

Означення 2.10. [9] Уніциклічний граф G називається базисним графом якщо виконуються такі умови:

- 1) для довільної вершини v графа G $\deg_v \leq 3$;
- 2) G містить рівно дві основні вершини;
- 3) в кожну основну вершину може проектуватись рівно одна 2-листокова вершина;
- 4) $\hat{G}$ містить лише основні вершини степеня 3.

Нехай $G_1 = (V_1, E_1)$ і $G_2 = (V_2, E_2)$ — два простих графи. Нехай $v_1 \in V_1$ та $v_2 \in V_2$. Граф $G = (V_1 \cup V_2 / \sim, E_1 \cup E_2)$ називатимемо склеюванням графів G_1 і G_2 по вершинах v_1 і v_2 .

Означення 2.11. [9] Нехай G_1 — базисний граф. Позначимо через u і v основні вершини графа G_1 . Уніциклічний граф G називається обплетенням графа G_1 ланцюгами $L_1, \dots, L_r$ якщо G утворений з G_1 склеюванням вершин степеня 2 циклу з кінцями ланцюгів $L_1, \dots, L_r$ таким чином, що кожна вершина степеня 2 склеюється з кінцем лише одного ланцюга, а також для будь-якої 1-листокової вершини w та суміжної з нею вершини a має місце нерівність:

$$d_G(u, v) + d_G(v, w) + 1 \neq d_G(u, a).$$

Лема 1. [9] Непарний уніциклічний граф G , що містить дві основні вершини, має метричну розмірність 2 тоді і тільки тоді коли виконується одна з умов:

- 1) G — базисний граф;
- 2) G є обплетенням деякого базисного графа G_1 .

Парний уніциклічний з двома основними вершинами та $|\hat{V}| = 2k$ має метричну розмірність 2 тоді і тільки тоді коли виконується одна з вищезгаданих умов та $d(u, v) \neq k$.

В статті [11] було введено іншу конструкцію обплетення графів.

Означення 2.12. [11] Уніциклічний граф G називається частковим обплетенням графа G_1 , що є уніциклічним графом (або простим циклом), ланцюгами $L_1, \dots, L_r$ якщо G утворений з G_1 склеюванням вершин степеня 2 циклу з кінцями ланцюгів $L_1, \dots, L_r$, причому кожна вершина степеня 2 склеюється з кінцем лише одного ланцюга.

Лема 2. [11] Нехай G — уніциклічний граф, що містить не більше однієї основної вершини. Граф G має метричну розмірність 2 тоді і тільки тоді, коли він є частковим обплетенням простого циклу C_n або частковим обплетенням мінорного графа G_1 ланцюгами $L_1, \dots, L_r$.

Позначимо символом n_v кількість листків, для яких v є внутрішньою вершиною.

Лема 3. [12] Якщо T — дерево (не ланцюг), то $\dim(T) = \sum_{v \in V, n_v \geq 1} (n_v - 1)$.

Використовуючи дане твердження, можемо сформулювати умови, за яких метрична розмірність дерева буде дорівнювати 2. Має місце наступна теорема.

Теорема 1. Дерево T має метричну розмірність $\dim(T) = 2$ тоді і тільки тоді коли у нього немає жодної вершини степеня більшого, ніж 3, існує або лише одна 3-листова і жодної 2-листової, або дві 2-листові вершини. Зокрема, не може існувати рівно одна 2-листова вершина.

Proof. Нехай T — дерево і $\dim(T) = 2$. Припустимо, що T не містить вершин степеня строго більшого, ніж 2. Тоді T є ланцюгом і згідно з результатом статті [7] $\dim(T) = 1$. Отримали суперечність. Отже, граф T містить принаймні одну вершину степеня 3.

Нехай T містить вершину w , що має степінь 4. Тоді можливі такі випадки:

- 1) w — єдина внутрішня вершина. Тоді їй відповідає 4 листки. За лемою 3 $\dim(T) = 3$.
- 2) w — вершина степеня 4, k — 2-листова вершина. Згідно з лемою 3 до базису потрібно взяти три листки, що є близькими до w і один листок, близький до k . Отримали ту саму рівність $\dim(T) = 3$.

Отже, всі вершини дерева мають степінь, що не перевищує 3.

Зауважимо, що довільне дерево T з $\dim(T) = 2$, яке не має вершин степеня більшого, ніж 3, не може мати рівно одну 2-листову вершину. Припустимо, що така вершина w існує. Тоді $\deg_w = 2$ або $\deg_w = 3$. В першому випадку згідно означення 2.5 w має бути внутрішньою, тому має виконуватись умова $\deg_w \geq 3$. В другому випадку якщо решта вершин дерева T мають степінь менший, ніж 3, то w — єдина внутрішня вершина, а тому буде 3-листовою. Якщо існуватиме ще хоча б одна вершина u степеня 3, то u буде також 2-листовою. В усіх випадках отримали суперечність.

Покажемо, що у T не може бути більше двох 2-листових вершин. Нехай T все ж має три 2-листові вершини v_1, v_2, v_3 . Тоді згідно з лемою 3 до базису потрібно взяти по одному листку p_1, p_2, p_3 , що є близькими до v_1, v_2, v_3 відповідно. В цьому випадку $\dim(T) = 3$. Отже, в дереві T може існувати рівно дві 2-листові вершини.

Доведемо в іншу сторону. Нехай T — дерево, що не має вершин степеня строго більшого, ніж 3. Причому серед вершин степеня 3 існує не більше двох 2-листових. Тоді якщо граф містить рівно одну вершину w степеня 3 і не має жодної 2-листової вершини, то w близька до трьох листків. Отже, згідно з лемою 3 $\dim(T) = 2$. У випадку коли в дерева T існує n внутрішніх вершин, причому дві з них є 2-листовими, а решта $n - 2$ мають по одному листку, $\dim(T) = 2$ за тією ж таки лемою 3. $\square$

Означення 2.13. Говоритимемо, що граф G_1 сконструйований з графа G_2 якщо G_1 отриманий з графа G_2 додаванням одного ребра.

Твердження 1. Якщо граф G сконструйований з дерева T , то G є уніциклічним графом.

Proof. Оскільки додання рівно одного ребра до дерева T призводить до появи рівно одного циклу, то граф G є уніциклічним. $\square$

Означення 2.14. Граф G_1 називається *листково сконструйований* з графа G_2 якщо G_1 отриманий з графа G_2 додаванням одного ребра, що з'єднує листок з довільною вершиною.

Теорема 2. Нехай $G = (V, E)$ — уніциклічний граф, листково сконструйований з дерева T і $\dim(T) < 3$. Тоді справедливі такі рівності:

1) Якщо $\dim(T) = 1$, то

$$\dim(G) = \dim(T) + 1;$$

2) Якщо $\dim(T) = 2$, то

(а) $\dim(G) = \dim(T) + 1$, якщо виконується одна з наступних умов:

i. в дереві T листок було з'єднано ребром з внутрішньою вершиною та утворений уніциклічний граф G є парним;

ii. в дереві T було з'єднано ребром листок з вершиною степеня 2 або листки, що належать різним 1-лишковим вершинам і в утвореному уніциклічному графі G не виконуються умови леми 1;

(б) $\dim(G) = \dim(T)$ у всіх інших випадках.

Зауважимо, що не виконання умов леми 1 означає, що уніциклічний граф G має рівно дві основні вершини p, q , не є базисним або обплетенням базисного графа ланцюгами або є парним базисним 2.8 (обплетенням парного базисного графа) і при цьому $d(p, q) = k$.

Proof. Нехай уніциклічний граф G — листково сконструйований з дерева T . Нехай $\dim(T) = 1$. Тоді з праці [7] випливає, що T є ланцюгом. Оскільки G — уніциклічний граф і відповідно не є ланцюгом, то $\dim(G) > 1$. Утворений граф G може бути простим циклом або уніциклічним

графом, що є частковим обплетенням циклу рівно одним ланцюгом. В першому випадку згідно [2] $\dim(G) = 2$. В другому випадку візьмемо в метричний базис графа G листок p , що проектується в вершину w циклу. Вершини p і w з'єднані простим ланцюгом, тому всі вершини, що розділяє p , будуть розділятися w . Як відомо $\dim(G) > 1$, тому існуватимуть вершини u, v в циклі, які не будуть розділятися w . Тому потрібно додати до базису вершину k , що є майже симетричною з w в циклі. Цього виявляється достатньо. Таким чином $\dim(G) = 2$, тобто $\dim(G) = \dim(T) + 1$.

Нехай маємо уніциклічний граф G , що є листково сконструйований з дерева T і $\dim(T) = 2$. Припустимо, що вершини u, v , які не з'єднані ребром в дереві T , з'єднані в G . Тоді можливі такі варіанти:

1. u, v — вершини в циклі G , які є листками в дереві T . Маємо 2 випадки:

1) u, v мають спільну внутрішню вершину w . Оскільки $\dim(T) = 2$, то згідно з теоремою 1 T може містити рівно дві 2-лишкові вершини або лише одну 3-лишкову і не має жодної вершини степеня більшого, ніж 3. Тому отриманий граф G є уніциклічним графом, що є частковим обплетенням простого циклу рівно одним ланцюгом або мінорним графом. В обох випадках згідно з лемою 2 $\dim(G) = 2$. Отже, $\dim(G) = \dim(T)$.

2) u, v належать різним внутрішнім вершинам w, q відповідно:

(а) w, q — 2-лишкові. За теоремою 1 в графі G не існуватиме жодної іншої 2-лишкової вершини, крім даних. Звідси випливає, що отриманий уніциклічний граф G буде частковим обплетенням простого циклу ланцюгами $L_1, \dots, L_r$. За лемою 2 $\dim(G) = 2$. Тому $\dim(G) = \dim(T)$.

(б) w — 2-лишкова, q — 1-лишкова вершини. У цьому випадку граф G буде частковим обплетенням мінорного графа ланцюгами $L_1, \dots, L_r$ і згідно з лемою 2 $\dim(G) = 2$. Отримуємо $\dim(G) = \dim(T)$.

(в) w, q — 1-лишкові. Уніциклічний граф G матиме рівно 2 основні вершини.

Тоді якщо виконуються умови лемми 1, то метрична розмірність графа G буде дорівнювати 2, матимемо $\dim(G) = \dim(T)$. В іншому випадку, для того щоб розділити довільну пару вершин до базису потрібно додати ще одну. Таким чином $\dim(G) = 3$. Отже, $\dim(G) = \dim(T) + 1$.

2. u, v — вершини в циклі графа G , одна з яких в дереві T є листком, а інша — внутрішньою вершиною. Маємо такі випадки:

- 1) u — листок, що є близьким, до 2-листокової вершини w , v — 2-листова вершина. Отримаємо уніциклічний граф G , що має рівно одну вершину степеня 4. Тоді, згідно з результатами статті [13], якщо G — непарний, то $\dim(G) = 2$. Тому $\dim(G) = \dim(T)$. В іншому випадку якщо G — парний уніциклічний граф, то $\dim(G) = 3$. Звідси випливає, що $\dim(G) = \dim(T) + 1$.
- 2) u — листок, що є близьким, до 2-листокової вершини w , v — 1-листова вершина. Оскільки 1-листова вершина як і 2-листова має степінь 3, то після додавання ребра в циклі графа G матимемо рівно одну вершину степеня 4. Як випливає зі статті [13], якщо отриманий уніциклічний граф G є парним, то $\dim(G) = 3$, відповідно $\dim(G) = \dim(T) + 1$. В іншому випадку $\dim(G) = 2$ або $\dim(G) = \dim(T)$.

3) u — листок, що є близьким, до 1-листокової вершини w , v — 2-листова вершина. Як і в попередньому випадку, в утвореному уніциклічному графі G 2-листова вершина матиме степінь 4. Згідно зі статтею [13], якщо G є парним, то $\dim(G) = 3$ ($\dim(G) = \dim(T) + 1$). Якщо G — непарний, то $\dim(G) = 2$ ($\dim(G) = \dim(T)$).

4) u — листок, що є близьким, до 1-листокової вершини w , v — 1-листова вершина. Вершина v є внутрішньою 1-листовою, тому $\deg_v = 3$. Після додавання ребра отримаємо уніциклічний граф G з $\deg_v = 4$. За результатами статті [13] граф G матиме $\dim(G) = 2$ або $\dim(G) = \dim(T)$ якщо він буде непарним і $\dim(G) = 3$ або $\dim(G) = \dim(T) + 1$ у протилежному випадку.

3. u, v — вершини в циклі G , одна з яких в T вершина степеня 2, а інша — листок. У випадку коли уніциклічний граф G має не більше однієї основної вершини він буде частковим обплетенням простого циклу або мінорного графа ланцюгами $L_1, \dots, L_r$. За лемою 2 $\dim(G) = 2$, тому $\dim(G) = \dim(T)$. Якщо граф G має рівно дві основні вершини та виконуються умови лемми 1, то $\dim(G) = 2$. Отже, $\dim(G) = \dim(T)$. В іншому випадку до базису потрібно взяти ще одну вершину, тому $\dim(G) = \dim(T) + 1$. □

Список використаних джерел

1. Khuller S. Landmarks in graphs / S. Khuller, B. Raghavachari, A. Rosenfeld // Disc. Appl. Math. — 1996 — **70** — P.217–229.
2. Harary F. On the the metric dimension of a graph / F. Harary, R. A. Melter // Ars Combinatoria — 1976 — **2** — P.191–195.
3. Slater P. J. Leaves of trees / P. J. Slater // Congr. Number — 1975 — **14** — P. 549–559.
4. Melter R. A. Metric bases in digital geometry / R. A. Melter, I. Tomescu // Comput. Vision, Graphics, Image Process. — 1984 — **25** — P. 113–121.

References

1. KHULLER, S., RAGHAVACHARI, B. and ROSENFELD, A. (1996) “Landmarks in graphs”, Disc. Appl. Math., **70**, pp. 217–229.
2. HARARY, F. and MELTER, R. A. (1976) “On the the metric dimension of a graph”, Ars Combinatoria, **2**, pp.191–195.
3. SLATER, P. J. (1975) “Leaves of trees”, Congr. Number, **14**, pp.549–559.
4. MELTER, R. A. and TOMESCU, I. (1984) “Metric bases in digital geometry”, Comput. Vision, Graphics, Image Process., **25**, pp. 113–121.

Список використаних джерел

5. Garey M. R. Computers and intractability: a guide to the theory of NP-completeness / M. R. Garey, D. S. Johnson // Freeman, New York, – 1979 – 338p.
6. Eroh L. A comparison between the metric dimension and zero forcing number of trees and unicyclic graphs/ L. Eroh, C. X. Kang, Y. Eunjeong // Acta Math. Sin., Engl. Ser. – 2017 – **33** – №6 – P. 731–747.
7. Chartrand G. Resolvability in graphs and the metric dimension of a graph/ G. Chartrand, L. Eroh, M. A. Johnson // Discrete Appl. Math. – 2000 – P. 99–113.
8. Sudhakara G. Graphs with metric dimension two — a characterization / G. Sudhakara, A. R. Hemanth Kumar // Adv. and Appl. in Disc. Math. – 2009 – **4** – №2 – P.169–186.
9. Dudenko M. On unicyclic graphs of metric dimension 2/ M. Dudenko, B. Oliynyk // Algebra and Discrete Math. – 2017 – **23** – №2 – P. 216–222.
10. Дуденко М. А. Уніциклічні графи метричної розмірності 2 / М. А. Дуденко // Наукові записки НаУКМА – 2015 – **165** – P. 7–10.
11. Дуденко М. А. Метрична розмірність уніциклічних графів, що містять не більше однієї основної вершини/ М. А. Дуденко // Вісник Львівського університету – 2017 – **83** – P. 189–195.
12. Sebo A. On Metric Generators of Graphs/ A. Sebo, E. Tannier // Mathematics of Operations Research – 2004 – **29** – №2 – P.383–393.
13. Dudenko M. On unicyclic graphs of metric dimension 2 with vertices of degree 4 / M. Dudenko, B. Oliynyk // Прикарпатські математичні публікації – 2018 (в друці).

References

5. GAREY, M. R. and JOHNSON, D. S. (1979) “Computers and intractability: a guide to the theory of NP-completeness”, Freeman, New York, 338 p.
6. EROH, L., KANG, C. X. and EUNJEONG, Y. (2017) “A comparison between the metric dimension and zero forcing number of trees and unicyclic graphs”, Acta Math. Sin., Engl. Ser., **33**:6, pp. 731–747.
7. CHARTLAND, G., EROH, L. and JOHNSON, M. A. (2000) “Resolvability in graphs and the metric dimension of a graph”, Discrete Appl. Math., pp. 99–113.
8. SUDHAKARA, G. and HEMANTH KUMAR, A. R. (2009) “Graphs with metric dimension two — a characterization”, Adv. and Appl. in Disc. Math., **4**:2, pp.169–186.
9. DUDENKO, M. and OLIYNYK, B. (2017) “On unicyclic graphs of metric dimension 2”, Algebra and Discrete Math., **23**:2, pp. 216–222.
10. DUDENKO, M. A. (2015) “Unicyclic graphs with metric dimension 2”, Nauk. Zapysky NaUKMA, **165**, pp. 7–10.
11. DUDENKO, M. A. (2017) “Metric dimension of unicyclic graphs with at most one main vertex”, Visnyk of the Lviv Univ. Series Mech. Math., **83**, pp. 189–195.
12. SEBO, A. and TANNIER, E. (2004) “On Metric Generators of Graphs”, Mathematics of Operations Research, **29**:2 , pp. 383–393.
13. DUDENKO, M. and OLIYNYK, B. (2018) “On unicyclic graphs of metric dimension 2 with vertices of degree 4”, Carpathian Mathematical Publications , (in print) .

Received: 11.07.2017

**ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ
РІВНЯННЯ,
МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА
ТА МЕХАНІКА**

УДК 539.376

Коновалюк Т. П., к.ф.-м.н., м.н.с.
Краснопольська Т. С., д.ф.-м.н., пр.н.с.
Печук Є. Д., к.ф.-м.н., н.с.
Соболь Т. В., к.ф.-м.н., м.н.с.

Внутрішня взаємодія як збуджувач хаосу в серцево-респіраторній системі

Інститут гідромеханіки НАНУ,
03680, м. Київ, вул. Желябова 8/4
e-mail: t.krasnopolskaya@tue.nl

T. P. Konovalyuk, PhD.
T. S. Krasnopolskaya, Dr.Sci.(Phys.-Math.)
E. D. Pechuk, PhD.
T. V. Sobol, PhD.

Internal interaction as chaos trigger in cardiorespiratory system

Institute of hydromechanics NASU,
03680, Kyiv, Zhelyabov str. 8/4
e-mail: t.krasnopolskaya@tue.nl

Хаотичні режими є характерними для динаміки кардіосистем здорової людини, тому одним з найбільш перспективних підходів до вивчення динаміки такого роду систем є нелінійно-динамічний підхід. Досліджено закономірності динаміки моделі ДеБура взаємодії серцево-судинної та респіраторної систем при врахуванні залежності параметрів респіраторної дії від характеристик кардіоінтервала. При цьому розглянуті лінійні наближення невідомих функціональних залежностей зворотного впливу. Методами теорії динамічних систем досліджено вплив параметрів зворотних зв'язків на сукупну кардіореспіраторну динаміку. Виявлено, що зворотний вплив частоти серцевих скорочень на частоту дихальних осциляцій призводить до іррегулярності динамічного режиму сукупної системи, тобто збуджувачем хаосу у серцево-респіраторній системі є внутрішня взаємодія підсистем: серцево-судинної та респіраторної.

Ключові слова: серцево-судинна система, респіраторна система, зворотній зв'язок, хаос.

The chaotic regimes are typical for the dynamics of a cardiosystem of a healthy man, that is why the most modern approach in the study of such system dynamics is the nonlinear dynamics approach. Laws of dynamics of the DeBoer's model of the cardiovascular and respiratory systems are studied taking into account dependence of parameters of a respiratory action on cardiointerval characteristics. The linear approximation of unknown functional dependences of feedback influence are investigated. By methods of the modern theory of dynamical systems the steady-state regimes of the modified models are studied. It is shown that a reverse influence of parameters of a cardiosystem frequency on frequency of respiratory oscillations results in irregularity of the dynamic mode of the combined system, i. e. a cause of chaos appearance in the cordially-respiratory system is internal interaction of subsystems : cardiovascular and respiratory.

Key Words: cardiovascular system, respiratory system, feedback, chaos.

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

1. Вступ

Дослідженню динаміки серцевих ритмів присвячено багато важливих наукових робіт [1-3]. Хаотичні режими є найбільш типовими і характерними для динаміки кардіосистем здорової людини, що доведено у сучасних наукових роботах [2]. Тому одним з найбільш перспективних підходів до вивчення динаміки кардіосистем здорової людини є нелінійно-динамічний підхід [4]. Добре відомою і фізіологічно коректною є модель ДеБоєра серцево-судинної системи, що запропонована в

роботі [1], яка не враховує зворотного впливу діяльності серця на параметри дихання. Вперше для цієї моделі зворотний вплив по типу оптимального керування було враховано та досліджено в моделі Грінченко – Рудницького [3]. Метою даної роботи є класифікація і дослідження закономірностей усталених режимів моделі [1,3] з внутрішньою взаємодією серцево-судинної та респіраторної систем методами сучасної теорії динамічних систем. Для цього розглянуті лінійні наближення невідомих функціональних залежностей зворотного впливу.

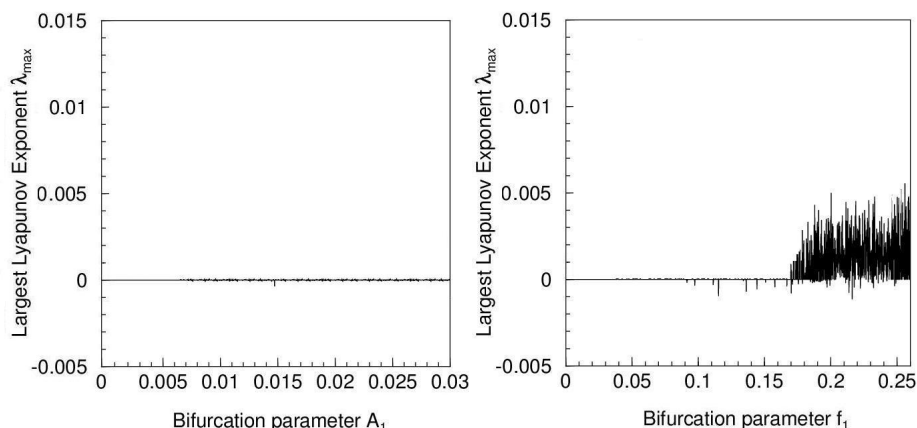


Рис. 1 Старший показник Ляпунова а) – системи (2)-(3), б) – системи(2)-(4)

2. Модель взаємодії серцево-судинної і респіраторної систем.

Модель взаємодії серцево-судинної і респіраторної систем, досліджувана в роботах [1] і [3], є системою дискретних відображень, що описують еволюцію характеристик стану кардіоінтервалу від удару до удару. Модель містить такі фізіологічні характеристики стану як систолічний тиск S , діастолічний тиск D , кардіоінтервал I (RR - інтервал), час артеріального загасання T . В рамках цієї моделі функції аорти моделюються за допомогою аортальної компресійної камери (Windkessel), закон Франка-Старлінга використано для моделювання міокарду. Враховано барорефлекторний механізм керування частотою серцевих скорочень (ЧСС) та периферічним опором. Вплив респіраторної системи на серцево-судинну обмежується лише механічною складовою і моделюється введенням відповідної адитивної добавки. Барорецепторний механізм керування рівнем артеріального тиску моделюється через введення так званого ефективного систолічного тиску $\hat{S}$. Згідно із загальноприйнятими фізіологічними нормами, в усталеному режимі $S_0 = 120$ мм рт. ст., $D_0 = 80$ мм рт. ст., $I_0 = 800$ мс, $T_0 = 1500$ мс. Після обезразмірювання по характерних величинах S_0 і T_0 , отримують наступну систему дискретних відображень [1,3]:

$$\begin{cases} D'_i = c_1 S'_{i-1} \exp(-I'_{i-1} / T'_{i-1}) \\ S'_i = D'_i + \gamma \frac{T_0}{S_0} I'_{i-1} + \frac{A}{S_0} \sin(2\pi f T_0 t_i) + \frac{c_2}{S_0} \\ I'_i = G_v \frac{S_0}{T_0} \hat{S}'_{i-\tau_v} + G_\beta \frac{S_0}{T_0} F(\hat{S}', \tau_\beta) + \frac{c_3}{T_0} \\ T'_i = 1 + G_\alpha S_0 / T_0 - G_\alpha S_0 / T_0 F(\hat{S}', \tau_\alpha) \\ \hat{S}'_i = 1 + 18 / S_0 \arctan(S_0 (S'_i - 1) / 18) \end{cases}, \quad (1)$$

де $i \geq 1$, $D' = D / S_0$, $S' = S / S_0$, $\hat{S}' = \hat{S} / S_0$,

$$I' = I / T_0, \quad T' = T / T_0, \quad c_1 = \frac{D_0}{S_0} \exp\left(\frac{I_0}{T_0}\right),$$

$$c_2 = S_0 - D_0 - \gamma I_0, \quad c_3 = I_0 - S_0 (G_v + G_\beta),$$

$$G_\alpha = 18 \text{ мс/мм рт.ст.}, \quad G_\beta = G_v = 9 \text{ мс/мм рт.ст.},$$

$\gamma = 0.016$ мм рт.ст./мс, $A = 3$ мм рт.ст. - амплітуда зміни тиску систоли, обумовлена рухом грудної клітки під час дихання, $f = 0.25$ Гц - частота

дихання, $t_i = \sum_{k=0}^{i-1} I_k$ - момент часу серцевого скорочення,

$$F = \frac{1}{9} (\hat{S}_{i-\tau-2} + 2\hat{S}_{i-\tau-1} + 3\hat{S}_{i-\tau} + 2\hat{S}_{i-\tau+1} + \hat{S}_{i-\tau+2}),$$

$\tau_\alpha = \tau_\beta = 4$, $\tau_v = 0$, якщо ЧСС менше за 75 удар/хв і $\tau_v = 1$, якщо ЧСС більше ніж 75 удар/хв.

Систему (1), після виключення залежних змінних, можна звести до системи трьох дискретних відображень з шістьма запізнюваннями по змінній S' , наступного вигляду:

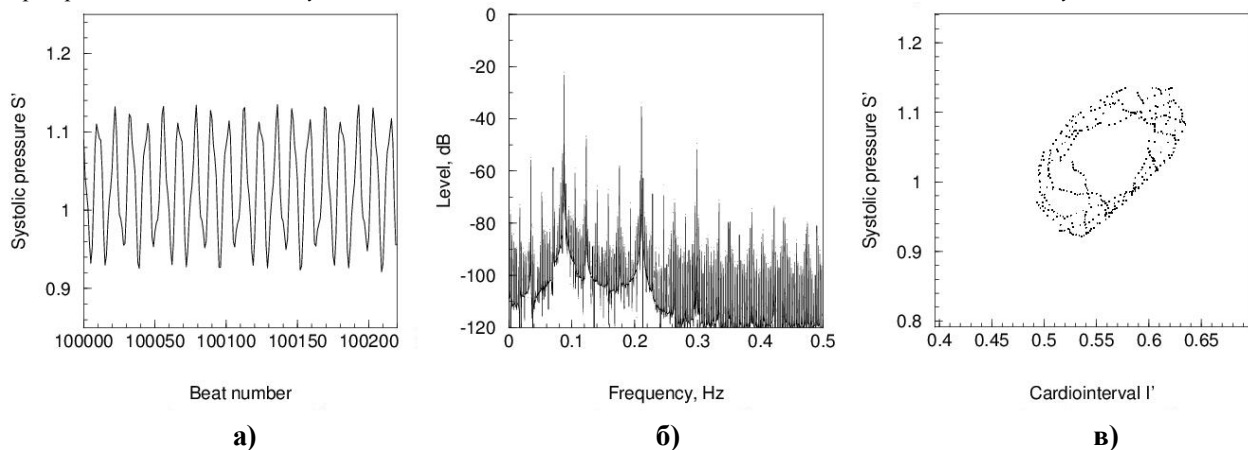


Рис. 2 Характеристики квазіперіодичного стану системи (2), без врахування зворотного зв'язку: а) – часова реалізація, б) – спектр потужності, в) – проекція фазового простору

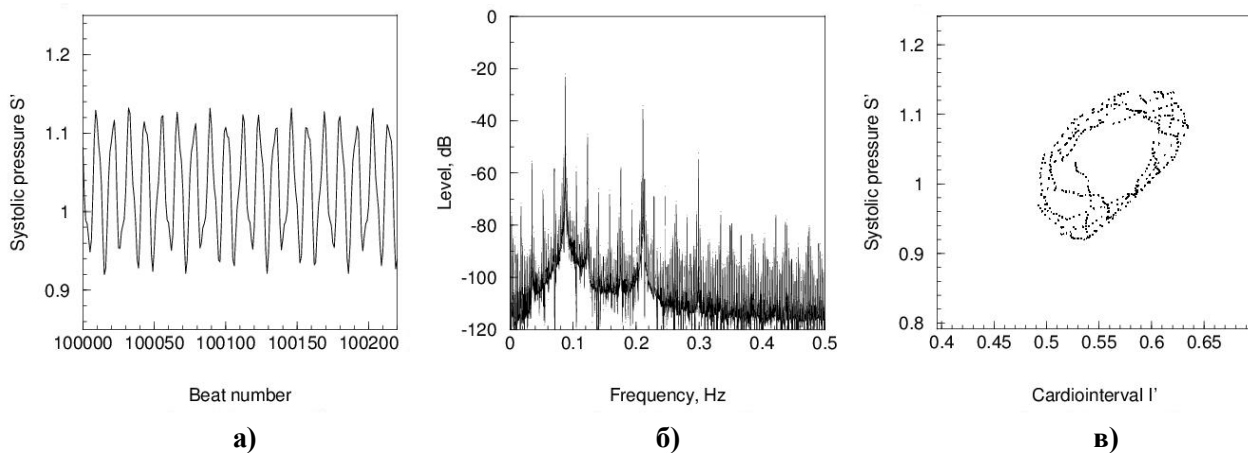


Рис. 3 Характеристики періодичного стану системи (2)-(3), при $A_1 = 0.03$

$$\begin{cases} S'_i = \varphi_1(I'_{i-1}, S'_{i-1}, S'_{i-2}, S'_{i-3}, S'_{i-4}, S'_{i-5}, S'_{i-6}, S'_{i-7}, t_{i-1}) \\ I'_i = \varphi_2(I'_{i-1}, S'_{i-1}, S'_{i-2}, S'_{i-3}, S'_{i-4}, S'_{i-5}, S'_{i-6}) \\ t_i = t_{i-1} + I'_{i-1} \end{cases}, \quad (2)$$

де φ_1 і φ_2 - нелінійні функції. Отримана система (2) зводиться шляхом заміни змінних до нелінійної системи дев'яти дискретних відображень без запізнювання. Таким чином, наявність такої неусувної властивості функціонування серцево-судинної системи людини як запізнювання, призводить до істотного підвищення порядку сукупної системи. Вплив респіраторної системи на серцево-судинну, в рамках даної моделі враховується параметрами A і f . Тому, зворотний вплив кардіосистеми може реалізовуватися шляхом впливу діяльності серця на ці дві характеристики. У даній роботі такий зворотний зв'язок моделюється найбільш простими лінійними зв'язками. Так, амплітуда зміни систолічного тиску, обумовлена рухом грудної клітки під час дихання, припускається залежною від значення тиску систоли на попередньому кардіоінтервалі

згідно із законом:

$$A^i = A_0 - A_1(S_{i-1} - S_0), \quad (3)$$

де $A_0 = A$, $A_1 \geq 0$, що моделює зменшення амплітуди дихання при збільшенні систолічного тиску. Частота дихання припускається залежною від частоти серцевих скорочень згідно залежності:

$$f^i = f_0 + f_1(1/I_{i-1} - 1/I_0), \quad (4)$$

де $f_0 = f$, $f_1 \geq 0$. Таким чином, в даній роботі досліджується система (2), при врахуванні зворотного впливу типу (3) або (4).

3. Усталені режими модифікованої моделі.

Перейдемо до дослідження усталених режимів системи (2). В силу нелінійності даної системи, її розв'язок можна отримати чисельно. Для чисельного моделювання вибираємо наступні початкові значення змінних: $I'[0] = 0.53$, $S'[-j] = 1.08$, $j = 0, \dots, 6$. На рис. 1.а показана залежність старшого показника Ляпунова

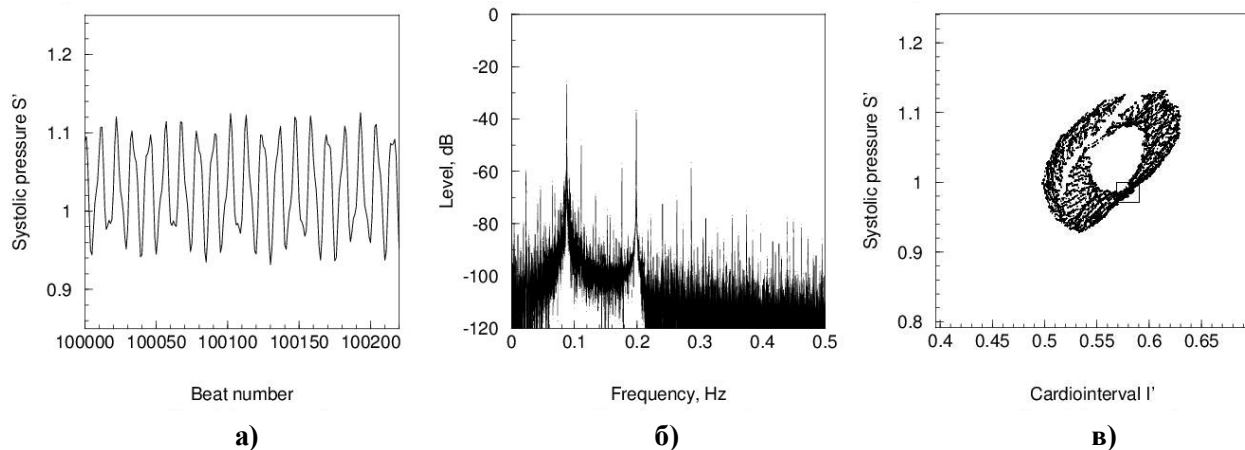


Рис. 4 Характеристики хаотичного стану системи (2)-(3), при $f_1 = 0.22$

системи (2)-(3), на проміжку $0 \leq A_1 \leq 0.03$. При нульовому значенні біфуркаційного параметра модель позбавлена зворотного впливу і характеризується регулярним усталеним режимом (рис. 2а-в.). При збільшенні значення параметра, спостерігається регуляризація усталеного режиму моделі. На рис. 3а-в. представлені характеристики граничного циклу, що реалізовується в системі при $A_1 = 0.03$.

Тепер розглянемо систему (2) із зворотним зв'язком (4) і біфуркаційним параметром f_1 . На рис. 1б. приведена залежність старшого показника Ляпунова моделі (2)-(4) на проміжку $0 \leq f_1 \leq 0.25$. В цьому випадку спостерігається жорсткий стрибок показника в додатну область (рис. 4а-в.). Таким чином, врахування лінійного зворотного зв'язку (4), для моделі (2), веде до моментальної хаотизації усталеного режиму сукупної системи.

Список використаних джерел

1. DeBoer R.W. Hemodynamic fluctuations and baroreflex sensitivity in humans: A beat-to-beat model / R.W. DeBoer, J. M. Karemaker, J. Strakee // Amer. J. Physiol. – 1987. – **253**, – P. H680–H689.
2. Goldberger Ary L. Clinical Electrocardiography: A Simplified Approach, 7th ed. / Ary L. Goldberger. – Philadelphia: Mosby Elsevier, 2006. – 420 p.
3. Гринченко В.Т. Модель взаємодії серцево-судинної і респіраторної систем / В.Т. Гринченко, А.Г. Рудницький // Акустический вестник. – 2006. – **9**, N 3. – С. 16–26.
4. Кузнецов С.П. Динамический хаос / С.П. Кузнецов. – М.: Физматлит, 2001. – 295 с.

4. Висновки

Дослідження модифікованої моделі серцево-судинної системи, при врахуванні прямого і зворотного впливу респіраторної системи, на основі біфуркаційних кривих старших показників Ляпунова, проекцій фазових портретів, часових реалізацій і частотних спектрів, дозволило виявити регулярні періодичні, а також хаотичні режими; визначити сценарії переходу до хаотичного режиму (перехід до хаосу відбувається через жорсткий стрибок, при врахуванні впливу кардіоінтервала на частоту дихання). Показано, що взаємозв'язок ритмів серця і дихання призводить до різкого переходу до хаосу, характерного для нормальної динаміки кардіосистем.

References

1. DEBOER, R.W., KAREMAKER, J. M. and STRAKEE, J. (1987). Hemodynamic fluctuations and baroreflex sensitivity in humans: A beat-to-beat model. *Amer. J. Physiol.*, 253, p.H680–H689.
2. GOLDBERGER, ARY L. (2006) *Clinical Electro-cardiography: A Simplified Approach*, 7th ed. Philadelphia: Mosby Elsevier.
3. GRINCHENKO, V.T. and RUDNITSKY A.G. (2006) Model' vzaimodeistvia serdechno-sosudistoi i respiratornoi sistem. *Akusticheskii vestnik*, 9(3). p.16–26.
4. KUZNETSOV, S.P. (2001) *Dinamicheskii chaos*. Moskva: Phismatlit.

Надійшла до редколегії 26.10.18

УДК 519.962, 517.98

О.А. Лагода¹, к.ф.-м.н., доцент
А.В. Чайковський², д.ф.-м.н., доцент

**Повільно зростаючі розв'язки лінійного
різницевого рівняння загального
вигляду на напівосі з початковими
умовами**

¹Київський національний університет
технологій і дизайну, 01011, Київ, вул.
Немировича-Данченка, 2.

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

e-mail: ¹oksala@ukr.net, ²chaikovskiyav@ukr.net

O. A. Lahoda¹, Ph.D., Associate Professor
A. V. Chaikovs'kyi², Doctor of science,
Associate Professor

**Slowly growing solutions of general linear
difference equation on a half-axis with
initial conditions**

¹ Kyiv National University of Technologi-
es and Design, 01011, Kyiv, 2 Nemyrovycha-
Danchenka st.

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

e-mail: ¹oksala@ukr.net, ²chaikovskiyav@ukr.net

У роботі розглянуто лінійне неоднорідне різницеве рівняння на напівосі з початковими умовами відносно елементів комплексного банахового простору. Класичні результати щодо рівнянь такого типу містять умови існування та єдиності обмежених та періодичних розв'язків. Отримано узагальнення відомих результатів на випадок повільно зростаючих розв'язків наведеного рівняння, тобто розв'язків, що за нормою можуть зростати лише повільніше довільної зростаючої показникової функції. Зокрема, одержано достатні умови в термінах операторно-значної генератрисы розглянутого рівняння.

Ключові слова: повільно зростаючий розв'язок, лінійне різницеве рівняння, банахів простір.

The general linear non-homogeneous difference equation on a half-axis with initial conditions where variables belong to a complex Banach space is considered in the paper. The coefficients of equation are bounded operators in the Banach space. Classical results about such equations are conditions of existence and uniqueness of bounded and periodic solutions. The problem is to investigate other classes of sequences, that contain solutions of the equation and find sufficient conditions for operator coefficients for existence of solution.

In the paper generalization of known results is obtained for the case of slowly growing solutions. Solution is called slowly growing iff it's norm is growing more slowly than any growing exponent function. Sufficient conditions are obtained for sequence of bounded operator coefficients for existence of slowly growing solution. Conditions are formulated in terms of generating function for given difference equation.

Key Words: slowly growing solution, linear difference equation, Banach space.

Communicated by Prof. Perestyuk M.O.

1 Introduction

Let's denote by B complex Banach space with norm $\|\cdot\|$ and zero element $\vec{0}$, by $L(B)$ – Banach space of linear bounded operators, which are mapping B to B , with norm, which we denote $\|\cdot\|$ too, I – identity operator, O – zero operator in $L(B)$, $\sigma(A)$ – spectrum of operator A from $L(B)$.

In the paper we consider difference equation

on half-axis with initial conditions

$$\begin{cases} x_n = \sum_{k=1}^{\infty} A_k x_{n-k} + y_n, & n \geq 1, \\ x_n = \alpha_n, & n \leq 0, \end{cases} \quad (1)$$

with respect to a sequence $\{x_n : n \geq 1\} \subset B$ for given sequences of elements $\{y_n : n \geq 1\} \subset B$, $\{\alpha_n : n \leq 0\} \subset B$ and operators $\{A_n : n \geq 1\} \subset L(B)$.

The important for applications question is to find conditions, under which solutions of equation (1) have special properties such as boundedness

or periodicity. Equation of such a form in the case of finite number of coefficients was investigated in the papers [1], [2]. In general case the equation was investigated in the paper of M. Gorodnii and O. Lahoda [3]. The main result was such a theorem:

Theorem 1.1. *Let function*

$$g(z) = \sum_{k=1}^{\infty} A_k z^k \quad (2)$$

be analytical in the disk $K_1 = \{z \in \mathbf{C} \mid |z| < d\}$, where $d > 1$ is fixed. Then difference equation (1) has bounded solution for any given bounded sequences $\{y_n : n \geq 1\} \subset B$, $\{\alpha_n : n \leq 0\} \subset B$ if and only if for any $z \in \mathbf{C}, |z| \leq 1$, operator

$$f(z) = I - g(z) \quad (3)$$

has continuous inverse operator $(f(z))^{-1}$.

In the paper conditions would be obtained, which are sufficient for solution belong to another class of sequences, which is wider than the class of bounded sequences.

2 Slowly growing solutions

Definition 2.1. A sequence $\{y_n : n \geq 1\}$ of elements of Banach space B is called slowly growing in B , if

$$\forall r > 1 : \sup_{n \geq 1} r^{-n} \|y_n\| < +\infty.$$

Let's note that any bounded sequence is slowly growing, but reverse one is not true. We can see it from the example of sequence $\{n^\gamma b : n \geq 1\}$, where $b \in B, b \neq \vec{0}, \gamma > 0$.

Let's consider the problem of slow growth of solution of equation (1). The main result of the article is the following theorem:

Theorem 2.1. *Let*

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|A_k\| < +\infty \quad (4)$$

and function $f(z)$ is analytical in the region $\{z \in \mathbf{C} \mid |z| < 1\}$. Then difference equation (1) has slowly growing solution for any given bounded sequence $\{\alpha_n : n \leq 0\} \subset B$ and any given slowly growing sequence $\{y_n : n \geq 1\} \subset B$ if and only if for any $z \in \mathbf{C}, |z| < 1$, operator $f(z)$ has continuous inverse operator $(f(z))^{-1}$.

For the proof of the theorem let's set several lemmas.

3 Auxiliary results

Lemma 3.1. *Let difference equation (1) has slowly growing solution for any given bounded sequence $\{\alpha_n : n \leq 0\} \subset B$ and any given slowly growing sequence $\{y_n : n \geq 1\} \subset B$. Then*

$$\forall z \in \mathbf{C}, |z| < 1 : \text{Ker } f(z) = \vec{0}.$$

Proof. Assume from the contrary that $\exists z \in \mathbf{C}, |z| < 1 \exists u \in B, u \neq \vec{0} : f(z)u = \vec{0}$. Let's denote $x_0 = zu$, $x_{-1} = z^2u$, ..., $x_{-m+1} = z^m u$, ..., $y_n = \vec{0}, n \geq 1$.

We will prove by the method of mathematical induction that $x_n = z^{-n+1}u, n \geq 0$.

We get base and step of induction as a corollary of (1)-(3):

$$\begin{aligned} x_1 &= A_1 x_0 + A_2 x_{-1} + A_3 x_{-2} + \dots = \\ &= A_1 zu + A_2 z^2 u + \dots = g(z)u = f(z)u + u = u; \\ x_{k+1} &= A_1 x_k + A_2 x_{k-1} + A_3 x_{k-2} + \dots = \\ &= A_1 z^{-k+1}u + A_2 z^{-k+2}u + A_3 z^{-k+3}u + \dots = \\ &= z^{-k}g(z)u = z^{-k}u, k \geq 1. \end{aligned}$$

So for $r \in (1, |z|^{-1})$ we have

$$r^{-n} \|x_n\| = |z|^{-n+1} r^{-n} \|u\| \rightarrow +\infty, n \rightarrow \infty.$$

It contradicts the condition of slow growth. Lemma is proved.

Lemma 3.2. *Let's denote $\varphi_0 = I$,*

$$\varphi_n = A_1 \varphi_{n-1} + A_2 \varphi_{n-2} + \dots + A_n \varphi_0, n \geq 1. \quad (5)$$

Let difference equation (1) has slowly growing solution for any given bounded sequence $\{\alpha_n : n \leq 0\} \subset B$ and any given slowly growing sequence $\{y_n : n \geq 1\} \subset B$. Then

$$\forall r > 1 : \sum_{k=0}^{\infty} r^{-k} \|\varphi_k\| < +\infty. \quad (6)$$

Proof. Let $x_0 = b, x_n = \vec{0}, n \leq -1, y_n = b, n \geq 1$, where b – arbitrary element from B . We will prove by the method of mathematical induction that

$$x_n = \left(\sum_{k=0}^n \varphi_k \right) b, n \geq 0. \quad (7)$$

As a corollary of (1), (5) we get base and step of induction:

$$x_0 = \varphi_0 b, x_n = \sum_{k=1}^n A_k x_{n-k} + b =$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{k=1}^{n-1} A_k(x_{n-k-1} + \varphi_{n-k})b + A_nb + b = \\ &= x_{n-1} + \left(\sum_{k=1}^{n-1} A_k\varphi_{n-k} + A_n\varphi_0 \right) b = \\ &= \left(\sum_{k=0}^{n-1} \varphi_k \right) b + \varphi_nb = \left(\sum_{k=0}^n \varphi_k \right) b, \quad n \geq 1. \end{aligned}$$

Using equality (7) and condition of slow growth by uniform boundedness principle we have: $\{ \left\| \sum_{k=0}^n \varphi_k \right\| r^{-n} : n \geq 0 \}$ – bounded sequence for any $r > 1$. Since for $r > 1$

$$\begin{aligned} \|\varphi_n\| r^{-n} &= \left\| \sum_{k=0}^n \varphi_k - \sum_{k=0}^{n-1} \varphi_k \right\| r^{-n} \leq \\ &\leq \left\| \sum_{k=0}^n \varphi_k \right\| r^{-n} + \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \varphi_k \right\| r^{-n+1}, \quad n \geq 1, \end{aligned}$$

– bounded sequence, so by Dirichlet theorem series $\sum_{k=0}^{\infty} r_1^{-k} \|\varphi_k\|$ is convergent for $r_1 > r$. As a consequence of arbitrariness of $r > 1$ we get what we need. Lemma is proved.

Lemma 3.3. *If condition (6) is true for a sequence (5) then for any $z \in \mathbf{C}$, $|z| < 1$, and for any $y \in B$ equation $f(z)x = y$ has a solution of the form*

$$x = \sum_{k=0}^{\infty} \varphi_k z^k y. \quad (8)$$

Proof. Indeed, if (6) is true, then series (8) is convergent by norm, and

$$\begin{aligned} f(z)x &= x - A_1zx - A_2z^2x - \dots - A_mz^mx - \\ &\dots = \sum_{k=0}^{\infty} \varphi_k z^k y - A_1 \sum_{k=0}^{\infty} \varphi_k z^{k+1} y - \dots \\ &- A_m \sum_{k=0}^{\infty} \varphi_k z^{k+m} y - \dots \end{aligned}$$

As a consequence of (4) and (6) this series is absolutely convergent and it is allowed to group summands. Let's group elements by powers of z :

$$\begin{aligned} f(z)x &= \varphi_0 y + (\varphi_1 - A_1\varphi_0)zy + \\ &+ (\varphi_2 - A_1\varphi_1 - A_2\varphi_0)z^2y + \dots + \\ &+ (\varphi_m - A_1\varphi_{m-1} - A_2\varphi_{m-2} - \dots - A_m\varphi_0)z^my + \dots = \\ &= \varphi_0 y = y. \end{aligned}$$

Lemma is proved.

Lemma 3.4. *If operator-valued function f is analytical in some open region $U \subset \mathbf{C}$, and for all $z \in U$ bounded inverse operator $(f(z))^{-1}$ exists, then function $(f(z))^{-1}$ is analytical in the region U .*

Proof. Using usual speculations about operator, which is close to identity, we can obtain for any $z_0 \in U$ and small enough $\delta > 0$

$$(f(z))^{-1} = (f(z_0))^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} ((f(z) - f(z_0))(f(z_0))^{-1})^k,$$

for $|z - z_0| < \delta$. Then we get boundedness of function $(f(z))^{-1}$, $|z - z_0| < \delta$, continuity of the function and finally, that function is differentiable in arbitrary point of region U , and so is analytical in the region. Lemma is proved.

Lemma 3.5. *If operator-valued function f is analytical for $|z| < 1$, and for any $|z| < 1$ exists $(f(z))^{-1} \in L(B)$, then*

$$(f(z))^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \varphi_k z^k, \quad |z| < 1,$$

where φ_k , $k \geq 0$, are defined by formula (5).

Proof. By lemma 3.4 there exists a sequence of operators $\{C_k : k \geq 1\} \subset L(B)$ such that $(f(z))^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} C_k z^k$, $|z| < 1$.

For $z \in \mathbf{C}$, $|z| < 1$ we have equality $(I - \sum_{k=1}^{\infty} A_k z^k) (\sum_{k=0}^{\infty} C_k z^k) = I$.

Series are absolutely convergent, so we can multiply it by Cauchy and obtain equalities

$$C_0 = I; \quad C_n = A_1 C_{n-1} + \dots + A_n C_0, \quad n \geq 1. \quad (9)$$

By comparing formulas (5) and (9), we obtain $\forall n \geq 0 : \varphi_n = C_n$. Lemma is proved.

Lemma 3.6. *Let condition (4) is satisfied, $\{\alpha_n : n \leq 0\} \subset B$ is bounded sequence, $\{y_n : n \geq 1\} \subset B$ is slowly growing sequence. Then the solution of a problem (1) can be obtained by formula*

$$x_n = \varphi_n u_0 + \varphi_{n-1} u_1 + \varphi_{n-2} u_2 + \dots + \varphi_0 u_n, \quad n \geq 0, \quad (10)$$

where $u_0 := \alpha_0$, $u_k := y_k + (A_{k+1}\alpha_{-1} + A_{k+2}\alpha_{-2} + A_{k+3}\alpha_{-3} + \dots)$, $k \geq 1$, φ_k , $k \geq 0$, are defined by formula (5).

Proof. Let's use the method of mathematical induction. For $n = 0$ we have $x_0 = \alpha_0$. Let's check the step of induction, using (1) and (5):

$$\begin{aligned} x_n &= \sum_{k=1}^{\infty} A_k x_{n-k} + y_n = \\ &= \sum_{k=1}^n A_k \left(\varphi_{n-k} \alpha_0 + \sum_{p=1}^{n-k} \varphi_{n-k-p} u_p \right) + \\ &+ \sum_{k=n+1}^{\infty} A_k \alpha_{n-k} + y_n = \\ &= \sum_{k=1}^n A_k \varphi_{n-k} \alpha_0 + \sum_{p=1}^n \sum_{k=1}^{n-p} A_k \varphi_{n-k-p} u_p + \\ &+ u_n = \varphi_n \alpha_0 + \sum_{p=1}^{n-1} \varphi_{n-p} u_p + u_n, \quad n \geq 1. \end{aligned}$$

Lemma is proved.

4 Proof of the main result

Proof. Necessity. Let difference equation (1) has slowly growing solution for any given slowly growing sequence $\{y_n : n \geq 1\} \subset B$, and any given bounded sequence $\{\alpha_n : n \leq 0\} \subset B$. Let $z \in \mathbf{C}, |z| < 1$ be fixed. Let's assume from the contrary that the operator $f(z)$ has no bounded inverse. Then by Banach theorem about inverse operator one of two conditions is true:

- a) $\exists u \neq \vec{0} : f(z)u = \vec{0}$;
- b) $\exists y \in B : \text{equation } f(z)u = y \text{ has no solution.}$

If, from the contrary, condition a) is true, we use lemma 3.1 and have contradiction with condition of slow growth. So a) is false.

Condition b) is false also as a consequence of lemmas 3.2, 3.3. Necessity is proved.

Sufficiency. Let for any $z \in \mathbf{C}, |z| < 1$, continuous inverse operator $(f(z))^{-1}$ exists. Let's fix slowly growing sequence $\{y_n : n \geq 1\} \subset B$ and bounded sequence $\{\alpha_n : n \leq 0\} \subset B$. Then

solution of difference equation (1) could be got by lemma 3.6 in the form (10).

As a consequence of condition (4), boundedness of sequence $\{\alpha_n : n \leq 0\}$ and slow growth of $\{y_n : n \geq 1\}$, sequence $\{x_n : n \geq 1\}$ is slowly growing.

Indeed, let's fix $r > 1$. Then such constants exist $L_u > 0, L_c > 0$, that

$$\forall n \geq 1 : \|u_n\| \leq L_u r^n, \|C_n\| \leq L_c r^n, \\ \|x_n\| = \|\varphi_n u_0 + \varphi_{n-1} u_1 + \dots + \varphi_0 u_n\| \leq L_u L_c r^n.$$

Theorem is proved.

Let's note that if the theorem conditions are true and sequence $\{y_n : n \geq 1\}$ is bounded, solution $\{x_n : n \geq 1\}$ could be unbounded. The example is $y_n = b, n \geq 0; \alpha_{-n} = \vec{0}, n \geq 1, \alpha_0 = b$, where $b \in B, b \neq \vec{0}$. Indeed, in the case equation

$$x_{n+1} = x_n + y_n, n \geq 0,$$

has solution $x_n = (n+1)b, n \geq 0$.

Список використаних джерел

1. Бенабдаллах М. Применение асимптотических разложений к исследованию бесконечной системы уравнений $Ax_{n+1} + Bx_n = f_n$ в банаховом пространстве / Бенабдаллах М., Руткас А.Г., Соловьев А.А. // Теория функций, функциональный анализ и их приложения. – 1985. – № 43. – С.9–17.
2. Томілов Ю. В. Асимптотична поведінка однієї рекурентної послідовності в банаховому просторі / Томілов Ю. В. // Асимптотичне інтегрування нелінійних рівнянь. – К.: Інститут математики АН України. – 1992. – С.146–153.
3. Городній М.Ф. Обмежені розв'язки двопараметричного різницевого рівняння у банаховому просторі / М.Ф. Городній, О. А. Лагода // Укр. математ. журнал – 2000. – Т.52, № 12. – С.1610 – 1614.

References

1. ENABDALLAH, M., RUTKAS, A., SOLOVYOV, A. (1985), "Application of asymptotic expansions to investigation of infinite system of equations $Ax_{n+1} + Bx_n = f_n$ in Banach space", *Theory of functions, functional analysis it's applications*, No. 43., p. 9 – 17.
2. TOMILOV, YU. (1992) "Asymptotic behaviour of a recurrent sequence in Banach space", *Asymptotic integration of nonlinear equations*, Kiev, Institute of mathematics of Academy of Sciences of Ukraine, p.146–153.
3. GORODNII, M., LAHODA O. (2000) "Bounded solutions of two-parametric difference equation in Banach space", *Ukrainian mathematical journal*, V.52, No 12., p.1610–1614.

Received: 25.05.2017

УДК 517.977

Ловейкін Ю.В., к. ф.-м. н., доцент
Сукретна А.В., к. ф.-м. н., доцент

Аналіз та оптимізація коливних процесів у двомасовій системі

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Акад.
Глушкова 4-е
e-mail: yuriyl@ua.fm, sukretna@gmail.com

Loveikin Y.V., Ph.D., Associate Professor
Sukretna A.V. Ph.D., Associate Professor

Analysis and optimization of oscillating processes in two-mass system

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Acad. Glushkova av., 4-e
e-mail: yuriyl@ua.fm, sukretna@gmail.com

Досліджується задача стабілізації коливних процесів у керованій двомасовій системі. Система складається з двох тіл, перше з них може рухатись уздовж горизонтальної осі під дією зовнішньої сили, друге тіло знаходиться на підвісі до першого і може виконувати коливні рухи як маятник. У розглядуваній двомасовій системі керуючим фактором виступає зовнішня сила, що діє на перше тіло системи. Встановлена форма оптимального керування зовнішньою силою для припинення коливань і стабілізації руху розглядуваної двомасової системи за найкоротший час при розгоні зі стану спокою до певної додатної швидкості.

Ключові слова: двомасова система, коливний процес, оптимізація, керування, стабілізація.

Stabilization problem of oscillation processes for two-mass controlling system is considered. The system consists of two bodies, the first one can move along the horizontal axis under the influence of an external force, the second body is on the suspension to the first and can perform vibrational movements as a pendulum. In the considered two-mass system, the controlling factor is an external force influencing on the first body of the system. The aim of controlling the external force is to vanish oscillating processes in the system in the shortest time and transfer the system during this time from the state of rest to uniform motion with a given speed without oscillations. The form of optimal control of external force for vanishing of oscillations and stabilization of the considered two-mass system in the shortest time when overlocking from rest state to the motion with certain positive speed is established. Program optimal control of external force with one switching point is constructed.

Key Words: two-mass system, oscillating process, optimization, controlling, stabilization.

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

1. Вступ

Вивчення коливних процесів є дуже важливим і має суттєве значення для найрізноманітніших розділів природознавства таких як механіка, фізика, техніки та ін. Вібраційні процеси у спорудах і машинах, електромагнітні коливання в радіотехніці та оптиці, автоколивання в системах регулювання та слідкуючих системах, звукові та ультразвукові коливання – всі ці явища описуються схожим математичними моделями. Розробці математичного апарату для опису таких моделей присвячена низка робіт. Найрозповсюдженішими, як правило, цілями процесів керування є або гасіння коливних процесів, або підтримка автоколивного режиму протягом, що найменше, довгого періоду часу [1, 2].

Коливання взаємодіючих систем з зосередженими та розподіленими параметрами є предметом чисельних досліджень. Зокрема, розглядалися пружні коливання стрижнів з підвішеним вантажем [3, 4]. Багато досліджень присвячено задачам про різноманітні динамічні гасителі пружних коливань [5].

У цій роботі продовжуються дослідження коливних процесів розпочаті у [6, 7]. Розглядається задача про мінімізацію коливань, які виникають у системі, що складається з двох тіл, перше тіло може рухатись уздовж горизонтальної осі під дією зовнішньої сили, друге тіло знаходиться на підвісі до першого і може виконувати коливні рухи внаслідок руху першого тіла. При цьому керуючим параметром у цій системі виступає зовнішня сила, що спричиняє рух першого тіла.

2. Постановка задачі.

Розглядатимемо систему, що складається з двох тіл. Одне тіло може рухатись вздовж горизонтальної осі, друге тіло закріплене на підвісі до першого і являю собою маятник. Еволюція такої двомасової системи описується системою двох диференціальних рівнянь другого порядку

$$\begin{cases} m_1 \ddot{x}_1 = F_p - m_2 \frac{g}{l} (x_1 - x_2) - F_r \operatorname{sign} \dot{x}_1, \\ \ddot{x}_2 = \frac{g}{l} (x_1 - x_2), \end{cases} \quad (1)$$

де x_1 – визначає положення першого тіла відносно горизонтальної осі, уздовж якої це тіло може рухатись, x_2 – положення другого тіла відносно тієї ж горизонтальної осі, m_1 , m_2 – маси першого і другого тіл відповідно, l – довжина підвісу другого тіла до першого, F_r – сила опору, що діє на перше тіло під час його руху унаслідок зовнішніх факторів, F_p – зовнішня сила, що спричиняє рух першого тіла уздовж горизонтальної осі, і змінюється у заданих межах

$$F_p \in [-F_{p\max}, F_{p\max}], \quad (2)$$

$F_{p\max}$ – стала, яка задає максимальну рушійну силу, що може діяти на перше тіло, g – стала прискорення вільного падіння.

При русі під дією сили F_p на перше тіло двомасової системи, що розглядається, зі стану спокою у цій системі можуть виникати коливні процеси, спричинені другим тілом системи, яке знаходиться на підвісі до першого тіла. Керуючи силою F_p , можна керувати коливними процесами у системі і, навіть, досягти припинення коливнь, перевівши систему до рівномірного руху з деякою додатною швидкістю.

Розглядатимемо процес руху розглядуваної двомасової системи зі стану спокою до рівномірного руху з додатною швидкістю, вибираючи керування зовнішньою силою так, щоб якнайшвидше припинити коливні процеси у системі.

Таким чином, процес, що розглядається, описується системою (1) з крайовими умовами

$$x_1(0) = x_2(0) = 0, \dot{x}_1(0) = \dot{x}_2(0) = 0; \quad (3)$$

$$\begin{aligned} x_1(T) - x_2(T) &= 0, \dot{x}_1(T) = \dot{x}_2(T) = v_0, \\ \ddot{x}_1(T) &= \ddot{x}_2(T), \end{aligned} \quad (4)$$

де $v_0 > 0$ – задана швидкість якої система має досягти, $T > 0$ – кінцевий момент часу, який є

нефіксованим і залежить від керування зовнішньою силою F_p .

Отже, будемо розглядати задачу оптимального керування, у якій керована система описується крайовою Задачею (1), (3), (4), керуючим параметром виступає зовнішня сила F_p з областю допустимих керувань (2), і критерієм якості

$$T \rightarrow \inf. \quad (5)$$

Для розв'язання задачі (1) – (5) використовуємо принцип максимуму Понтрягіна [8, 9].

3. Оптимальне керування системою

Для зручності подальшого розгляду поставленої задачі уведемо такі позначення:

$$y_1 = \dot{x}_1, \quad y_2 = \dot{x}_2, \quad q = g/l > 0,$$

$$p = q \frac{m_2}{m_1} > 0, \quad f_p = \frac{F_p}{m_1}, \quad f_r = \frac{F_r}{m_1}.$$

Тоді еволюційна система (1) переписується у вигляді

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = y_1, \\ \dot{x}_2 = y_2, \\ \dot{y}_1 = f_p - p(x_1 - x_2) - f_r \operatorname{sign} y_1, \\ \dot{y}_2 = q(x_1 - x_2), \end{cases} \quad (6)$$

а задача (1) – (5) –

$$\begin{cases} T \rightarrow \inf, \\ \begin{cases} \dot{x}_1 = y_1, \\ \dot{x}_2 = y_2, \\ \dot{y}_1 = f_p - p(x_1 - x_2) - f_r \operatorname{sign} y_1, \\ \dot{y}_2 = q(x_1 - x_2), \end{cases} \\ x_1(0) = x_2(0) = 0, y_1(0) = y_2(0) = 0, \\ x_1(T) = x_2(T), y_1(T) = y_2(T) = v_0, \\ \dot{y}_1(T) = \dot{y}_2(T), \\ f_p \in [-f_{p\max}, f_{p\max}], \end{cases} \quad (7)$$

де $f_{p\max} = F_{p\max} / m_1$.

Перш ніж розв'язувати одержану задачу (7), еквівалентну вихідній задачі (1) – (5), звернемо увагу на умову $\dot{y}_1(T) = \dot{y}_2(T)$ на правому кінці (у кінцевий момент часу). Враховуючи інші умови на правому кінці, відразу маємо, що $\dot{y}_2(T) = 0$. Тоді для виконання указаної умови потрібно, щоб $\dot{y}_1(T) = 0$, а для цього достатньо встановити значення рушійної сили f_p у кінцевий момент часу T рівною $f_r \operatorname{sign} y_1$, тобто $f_p(T) = f_r \operatorname{sign} y_1$. І, якщо в подальшому (для значень $t > T$)

залишити значення рушійної сили без змін, тобто $f_p(t) = f_r \operatorname{sign} y_1$ для $t > T$, то після моменту часу T одержимо рівномірний рух двомасової системи із заданою додатною швидкістю v_0 .

При розв'язанні задачі для визначеності розглядатимемо випадок руху системи зі стану спокою у додатному напрямку координатної осі.

Застосовуючи принцип максимуму Понтрягіна, з умови максимуму маємо, що оптимальне керування визначається функцією

$$f_p^*(t) = \begin{cases} f_{p\max}, & \Psi_3(t) > 0, \\ -f_{p\max}, & \Psi_3(t) < 0, \end{cases} \quad (8)$$

де $\Psi_3(t)$ – компонента розв'язку

$$\Psi(t) = (\Psi_1(t), \Psi_2(t), \Psi_3(t), \Psi_4(t))$$

спряженої системи диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} \dot{\Psi}_1 = q\Psi_3 - p\Psi_4, \\ \dot{\Psi}_2 = -q\Psi_3 + p\Psi_4, \\ \dot{\Psi}_3 = -\Psi_1, \\ \dot{\Psi}_4 = -\Psi_2, \end{cases} \quad (9)$$

який задовольняє умови трансверсальності

$$\begin{aligned} \Psi_1(0) &= \lambda_1, \Psi_2(0) = \lambda_2, \\ \Psi_3(0) &= \lambda_3, \Psi_4(0) = \lambda_4, \\ \Psi_1(T) &= -\lambda_5, \Psi_2(T) = \lambda_5, \\ \Psi_3(T) &= -\lambda_6, \Psi_4(T) = -\lambda_7, \end{aligned} \quad (10)$$

де $\lambda_0, \dots, \lambda_7$ – множники Лагранжа у функції Лагранжа

$$L = \lambda_0 T + \lambda_1 x_1(0) + \lambda_2 x_2(0) + \lambda_3 y_1(0) + \lambda_4 y_2(0) + \\ + \lambda_5 (x_1(T) - x_2(T)) + \lambda_6 (y_1(T) - v_0) + \lambda_7 (y_2(T) - v_0)$$

Розв'язуючи систему (9), одержуємо

$$\begin{aligned} \Psi_1(t) &= -K_2 + K_3 \sqrt{p+q} \sin(\sqrt{p+q}t) - \\ &\quad - K_4 \sqrt{p+q} \cos(\sqrt{p+q}t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_2(t) &= -K_2 \frac{q}{p} - K_3 \sqrt{p+q} \sin(\sqrt{p+q}t) + \\ &\quad + K_4 \sqrt{p+q} \cos(\sqrt{p+q}t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_3(t) &= K_1 + K_2 t + K_3 \cos(\sqrt{p+q}t) + \\ &\quad + K_4 \sin(\sqrt{p+q}t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_4(t) &= (K_1 + K_2 t)q / p - K_3 \cos(\sqrt{p+q}t) - \\ &\quad - K_4 \sin(\sqrt{p+q}t), \end{aligned}$$

де K_1, K_2, K_3, K_4 – довільні сталі. І, враховуючи умови (10), маємо $K_2 = 0$.

Таким чином, для явного визначення оптимального керування $f_p^*(t)$ (8) одержуємо функцію $\Psi_3(t)$ у вигляді

$$\Psi_3(t) = K_1 + K_3 \cos(\sqrt{p+q}t) + K_4 \sin(\sqrt{p+q}t).$$

В залежності від значень констант K_1, K_3, K_4 функція $\Psi_3(t)$ може, або не змінювати знак на інтервалі $[0, T]$, або змінювати знак скінченну кількість разів на вказаному інтервалі.

4. Побудова програмного керування

Розглянемо окрема декілька випадків поведінки функції $\Psi_3(t)$, а саме, випадки, коли ця функція є знакосталою, і коли змінює знак.

Для скорочення записів позначимо $u = f_p - f_r \operatorname{sign} y_1$, тоді еволюційна система, що описує рух двомасової системи, переписується у вигляді

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = y_1, \\ \dot{x}_2 = y_2, \\ \dot{y}_1 = u - p(x_1 - x_2), \\ \dot{y}_2 = q(x_1 - x_2), \end{cases} \quad (11)$$

а її фазові траєкторії задаються системою

$$\begin{cases} U_1(x_1, x_2, y_1, y_2, u) = \\ = (py_1 + qy_2)^2 - 2up(px_1 + qx_2) = C_1, \\ U_2(x_1, x_2, y_1, y_2, u) = \\ = 2u(x_1 - x_2) - (p+q)(x_1 - x_2)^2 - (y_1 - y_2) = C_2, \\ U_3(x_1, x_2, y_1, y_2, u) = \\ = \arctg \frac{\sqrt{p+q}(y_1 - y_2)}{(p+q)(x_1 - x_2) - u} + \frac{\sqrt{p+q}}{pu} (py_1 + qy_2) = C_3, \end{cases}$$

де $C_1, C_2, C_3 \in \mathbb{R}$ – довільні сталі, які визначають кожну конкретну траєкторію, що проходить через конкретну точку.

У ситуації, коли функція $\Psi_3(t)$ є знакосталою, тобто $\Psi_3(t) > 0$, якщо система рухається у додатному напрямку координатної осі, і, відповідно, $f_p(t) = f_{p\max}$, $t \geq 0$, не представляється можливим перевести розглядувану двомасову систему із початкового стану (3) у кінцевий стан (4), бо траєкторії системи (6) не можуть одночасно проходити через точки фазового простору, які задають початковий і кінцевий стан двомасової системи.

Якщо функція $\Psi_3(t)$ змінює знак, для одержання керування зовнішньою силою, що діє на перше тіло, і переведення системи із початкового стану у кінцевий стан достатньо, щоб функція $\Psi_3(t)$ один раз змінила знак на інтервалі $[0, T]$. Точка переключення керування визначається системою

$$U_1(x_1, x_2, y_{10}, y_{20}, u_1) = 0,$$

$$U_2(x_1, x_2, y_{10}, y_{20}, u_1) = 0,$$

$$U_3(x_1, x_2, y_{10}, y_{20}, u_1) = 0,$$

$$U_1(x_1, x_2, y_{1T}, y_{2T}, u_2) = (p + q)^2 v_0^2 - 2pu_2(p + q)x_T,$$

$$U_2(x_1, x_2, y_{1T}, y_{2T}, u_2) = 0,$$

$$U_3(x_1, x_2, y_{1T}, y_{2T}, u_2) = (p + q)^{3/2} v_0 / (pu_2),$$

де x_1, x_2 – положення в момент переключення, y_{10}, y_{20} – швидкості тіл до моменту переключення керування, y_{1T}, y_{2T} – швидкості тіл після моменту переключення керування, u_1, u_2 – керування зовнішньою силою до переключення керування (коли $\Psi_3(t) > 0$) і після переключення керування (коли $\Psi_3(t) < 0$), x_T – кінцеве положення системи.

Список використаних джерел

1. Черноусько Ф.Л., Акуленко Л.Д., Соколов Б.Н. Управление колебаниями. – М.: Наука, 1980. – 384 с.
2. Westphal, Louis C. Handbook of Control Systems Engineering // The Springer International Series in Engineering and Computer Science. – Springer, 2001. – V. 635. – 1063 p.
3. Weaver W., Timoshenko S.P., Young D.H. Vibration Problems in Engineering. – John Wiley & Sons, 1990. – 624 p.
4. Филиппов А.П. Колебания деформируемых систем. – М.: Машиностроение, 1970. – 734 с.
5. Ерофеев В.И., Кажжаев В.В., Семерикова Н.П. Волны в стержнях. Дисперсия. Диссипация. Нелинейность. – М.: Физматлит, 2002. – 208 с.
6. Ловейкін Ю.В. Керування коливними процесами в одній двомасовій системі // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки. – 2012. – № 4. – С. 60-63.
7. Ловейкін Ю., Ромасевич Ю. Оптимізація керування одномасовими механічними системами // Вісник ТНТУ. Математичне моделювання, математика, фізика. – 2010. – Том 15. – № 4. – С.140-146.
8. Понтрягин Л.С. Математическая теория оптимальных процессов / Понтрягин Л.С., Болтянский В.Г., Гамкрелидзе Р.В., Мищенко Е.Ф. – М.: Наука, 1983. – 393 с.
9. Кротов В.Ф. Основы теории оптимального управления. – М.: Высшая школа, 1990. – 431 с.

5. Висновки

У роботі розглянуто систему, що складається з двох тіл, перше з яких може рухатись вздовж горизонтальної осі, друге – є маятником, який знаходиться на підвісі до першого тіла. Для такої двомасової системи розглянуто розгінний рух зі стану спокою до заданої швидкості, а саме, розглянуто задачу усунення коливних процесів, які виникають у системі після початку руху зі стану спокою. У роботі, використовуючи принцип максимуму Понтрягіна, побудовано програмне оптимальне зовнішньою силою, яка діє на перше тіло і спричиняє рух системи. Побудоване керування має одну точку переключення.

References

1. CHERNOUSKO F.L., AKULENKO L.D., SOKOLOV B.N. (1980) *Upravlenie kolebaniyami*. Moskva: Nauka.
2. WESTPHAL, LOUIS C. (2001) Handbook of Control Systems Engineering. *The Springer International Series in Engineering and Computer Science*. 635. 1063 p.
3. WEAVER W., TIMOSHENKO S.P., YOUNG D.H. (1990) *Vibration Problems in Engineering*. John Wiley & Sons.
4. FILIPPOV A.P. (1970) *Kolebaniya deformiruemoy system*. Moskva: Mashinostroenie.
5. EROFEEV V.I., KAZHAEV V.V., SEMIRIKOVA N.P. (2002) *Volny v sterzhnyach. Dispersiya. Dissipatiya. Nelineinost*. Moskva: Fizmatlit.
6. LOVEIKIN YU.V. (2012) Keruvannya kolyvnymy procesamy v odnii dvomasovii systemi. *Visnyk Kyivskogo nacionalnogo universytetu imeni Tarasa Shevchenka. Seriya fizyko-matematychni nauky*. (4). p. 60-63.
7. LOVEIKIN YU., ROMASEVICH YU. (2010) Optymizaciya keruvannya odnomasovymy mechanichnymy systemamy. *Visnyk TNTU. Matematychne modelyuvannya, matematika, fizyka*. 15 (4). p.140-146.
8. PONTRYAGIN I.S. et al. (1983) *Matematicheskaya teoriya optimalnykh procesov*. Moskva: Nauka.
9. KROTOV V.F. (1990) *Osnovy teorii optimalnogo upravleniya*. Moskva: Vysshaya shkola.

Надійшла до редколегії 28.11.18

УДК 532.5

Остос О. Х., аспірант

**Термомеханічна задача про коливання
в'язкопружного гумоподібного стержня
при кінематичному навантаженні**

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4е
e-mail: ostos.alexander1994@gmail.com

O. J. Ostos, PhD Student

**Thermomechanical problem on vibration of a
viscoelastic rubberlike rod by kinematic load**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
83000, Kyiv, Glushkova pr., 4e
e-mail: ostos.alexander1994@gmail.com

Розглянуто задачу про коливання в'язкопружного стержня при кінематичному навантаженні, прикладеному на одному з його кінців. Досліджено властивості гумоподібного матеріалу на прикладі бутилкаучука, з якого складається стержень. Отримані амплітудно-частотні характеристики для напруження та деформації. На основі скінченно-елементної моделі побудовано розв'язок задачі з врахуванням в'язкопружних властивостей бутилкаучука. Проведені порівняння при трьох різних значеннях температури матеріалу. Проаналізовано результати згідно з класичною теорією пружності, зроблені відповідні висновки щодо поведінки даного гумоподібного матеріалу. Перевірено достовірність значень частот для перших резонансів на основі теоретичних розрахунків.

Ключові слова: бутилкаучук, в'язкопружний стержень, температура, комплексні модулі.

By using the complex moduli the problem on vibration of the viscoelastic rod was solved. The complex shear and Young's moduli of a rubberlike material should exhibit the same dependence on frequency. The viscoelastic rod under kinematic loading was considered. The properties of rubberlike materials such as filled butyl rubber were investigated. The transition frequencies of high-damping materials occur at or near frequencies that are normally of interest in vibration problems at room temperature. The strain and stress amplitude-frequency characteristics at temperatures of 5, 20, and 35°C were obtained. For solving the problem a finite element model was applied. According to the theory of elasticity an analysis of the results was done. Conclusions about the behavior of the filled butyl rubber were made. The reliability of the values of frequencies on the first resonances was checked. Butyl rubber is essentially polyisobutylene, in which a small proportion of the isobutylene molecules has been replaced by isoprene. Using the graphs of frequency-response curves at three different values of the temperature were compared. The numerical results by the general theoretical laws on vibration in damped mechanical systems were confirmed.

Key Words: filled butyl rubber, viscoelastic rod, temperature, complex moduli.

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

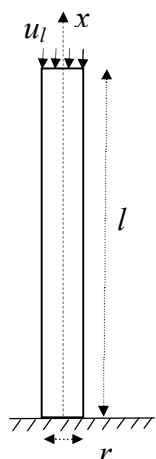
1. Вступ

Дослідження дисипативних властивостей матеріалів стало необхідним в сучасній науці. В таких сферах як повітряна, морська та автомобільна промисловість використання в'язкопружних матеріалів та дисипативних компонентів зробило можливим працювати навіть у випадках, коли коливання є небезпечними для механічних та електронних систем або несприятливі для людського комфорту чи продуктивності роботи. В даній статті дослідження зосереджене на динамічних та механічних властивостях гумоподібних в'язкопружних матеріалів,

які стали основою для інженерів та фізиків при роботі з коливальними системами. Це питання є найбільш важливим для морських суден та аерокосмічних кораблів. В даній роботі досліджуються дисипативні властивості гумоподібних матеріалів на прикладі заповненого бутилкаучука при різних температурах. Внутрішнє затухання гумоподібних матеріалів описується стаціонарними рівняннями руху. Бутилкаучук є компонентом твердого ракетного палива, а також він використовується в будівельній, гумотехнічній сферах промисловості, наприклад для виготовлення антикорозійних, герметизуючих, гідроізолюючих покриттів. Резонансні частоти таких

високочутливих матеріалів як бутилкаучук виникають приблизно на тих частотах, які зазвичай зустрічаються в задачах коливання при кімнатній температурі, і ці перехідні частоти є значно нижчими ніж резонансні частоти звичайної гуми. Розрахунки були проведені на основі скінченно-елементної моделі.

2. Постановка задачі



Дослідження властивостей бутилкаучука проводиться на прикладі скінченного прямокутного стержня $0 \leq x \leq l$, шириною $r = 0.01$ м, та довжиною $l = 0.2$ м, із заданими кінематичними умовами на його кінцях:

$$\begin{aligned} \tilde{u}(x)|_{x=0} &= 0 \\ \tilde{u}(x)|_{x=l} &= u_l = 0.0001 \text{ м} \end{aligned} \quad (1)$$

Бутилкаучук є гумоподібним матеріалом. Дослідження проводяться через амплітуди напруження та деформації, тому й рівняння руху записуються через деформації:

$$\frac{d}{dx}(\tilde{E}\tilde{\varepsilon}) + l\rho\omega^2\tilde{\varepsilon} = 0 \quad (2)$$

де $\rho = 1200 \text{ кг/м}^3$ – густина бутилкаучука,

$\tilde{\varepsilon} = \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} = \varepsilon' + \varepsilon''$ – деформація, $\tilde{E} = E' + iE''$ –

комплексний модуль Юнга, ω – частота.

Тоді рівняння руху набуває вигляду

$$\frac{d}{dx}((E' + iE'')(\varepsilon' + i\varepsilon'')) + l\rho\omega^2(\varepsilon' + i\varepsilon'') = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dx}[(E'\varepsilon' - E''\varepsilon'') + i(E'\varepsilon'' + E''\varepsilon')] + l\rho\omega^2(\varepsilon' + i\varepsilon'') = 0$$

звідки отримуємо систему звичайних диференціальних рівнянь:

(ε' , ε'' – невідомі)

$$\begin{cases} \frac{d}{dx}(E'\varepsilon' - E''\varepsilon'') + l\rho\omega^2\varepsilon' = 0 \\ \frac{d}{dx}(E'\varepsilon'' + E''\varepsilon') + l\rho\omega^2\varepsilon'' = 0 \end{cases} \quad (3)$$

а крайові умови в термінах деформації будуть наступними:

$$\begin{cases} \varepsilon'(0) = \varepsilon'(l) = \varepsilon''(0) = 0 \\ \varepsilon''(l) = -\varepsilon_0 \end{cases} \quad (4)$$

Розв'язок системи диференціальних рівнянь (3) з урахуванням крайових умов (4) наступний:

$$\begin{aligned} \varepsilon'(x) &= -\frac{\varepsilon_0 e^{\frac{-E'\rho l \omega^2}{E'^2 + E''^2} x} \cos(\frac{E''\rho l \omega^2}{E'^2 + E''^2} x)}{e^{\frac{-E'\rho l^2 \omega^2}{E'^2 + E''^2} x} \sin(\frac{E''\rho l^2 \omega^2}{E'^2 + E''^2} x)} \\ \varepsilon''(x) &= -\frac{\varepsilon_0 e^{\frac{-E'\rho l \omega^2}{E'^2 + E''^2} x} \sin(\frac{E''\rho l \omega^2}{E'^2 + E''^2} x)}{e^{\frac{-E'\rho l^2 \omega^2}{E'^2 + E''^2} x} \sin(\frac{E''\rho l^2 \omega^2}{E'^2 + E''^2} x)} \end{aligned} \quad (5)$$

Відповідно амплітуда деформацій буде

$$\begin{aligned} \varepsilon_a(x) &= \sqrt{\varepsilon'^2(x) + \varepsilon''^2(x)} = \\ &= \frac{\varepsilon_0 e^{\frac{-E'\rho l \omega^2}{E'^2 + E''^2} x}}{e^{\frac{-E'\rho l^2 \omega^2}{E'^2 + E''^2} x} \sin(\frac{E''\rho l^2 \omega^2}{E'^2 + E''^2} x)} \end{aligned} \quad (6)$$

а амплітуда напруження знаходиться з формули

$$\sigma_a(x) = \varepsilon_a(x)|\tilde{E}|, \text{ де } |\tilde{E}| = \sqrt{E'^2 + E''^2}.$$

3. Розв'язок задачі та результати

Найбільш цікавою зоною стержня є його верхня частина, поблизу прикладання переміщення, тому точкою дослідження було вибрано $x = 0.9l$.

Властивості бутилкаучука було досліджено при трьох різних значеннях температури:

1) $T = 5^\circ\text{C}$

$$G' = 1.3 \cdot 10^7 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}, \quad \eta = \frac{G''}{G'} = 1.5 \Rightarrow$$

$$G'' = 1.95 \cdot 10^7 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}, \quad \nu = 0.49,$$

$$E' = 2(1 + \nu)G' = 3.874 \cdot 10^7 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2},$$

$$E'' = 2(1 + \nu)G'' = 5.811 \cdot 10^7 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2},$$

де $\tilde{G} = G' + iG''$ – комплексний модуль зсуву,
 ν – коефіцієнт Пуассона, η – тангенс кута втрат.

2) $T = 20^\circ\text{C}$

$$G' = 5,1 \cdot 10^6 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}, \quad \eta = 1,25 \quad \Rightarrow$$

$$G'' = 6,375 \cdot 10^6 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}, \quad \nu = 0,49,$$

$$E' = 2(1 + \nu)G' = 15,198 \cdot 10^6 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2},$$

$$E'' = 2(1 + \nu)G'' = 9,355 \cdot 10^6 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}.$$

3) $T = 35^\circ\text{C}$

$$G' = 2,4 \cdot 10^6 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}, \quad \eta = 0,9 \quad \Rightarrow$$

$$G'' = 2,16 \cdot 10^6 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}, \quad \nu = 0,49,$$

$$E' = 2(1 + \nu)G' = 7,152 \cdot 10^6 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2},$$

$$E'' = 2(1 + \nu)G'' = 6,437 \cdot 10^6 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}.$$

Застосовуючи метод скінченних елементів, було побудовано амплітудно-частотну характеристику для напруження та деформації при 5°C , 20°C та відповідно 35°C .

.... $T = 5^\circ\text{C}$

---- $T = 20^\circ\text{C}$

— $T = 35^\circ\text{C}$

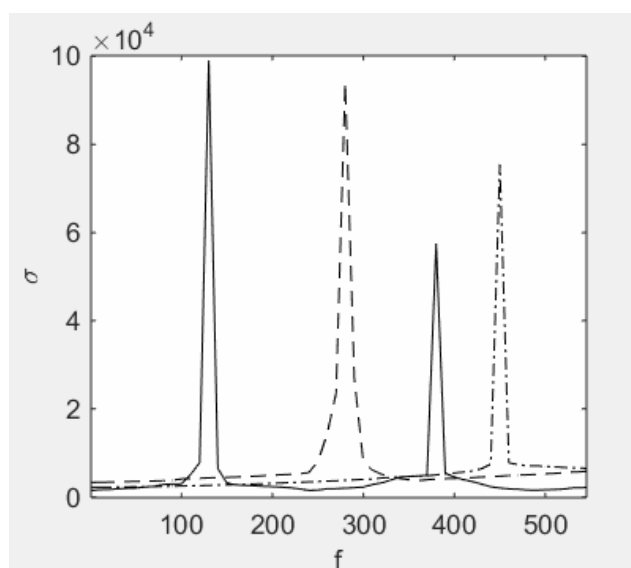


Рис. 1. Залежності амплітуди напруження σ_a від частоти f (Гц) при різних температурах

Зрозуміло, що закон Гука працює і для комплексних модулів.

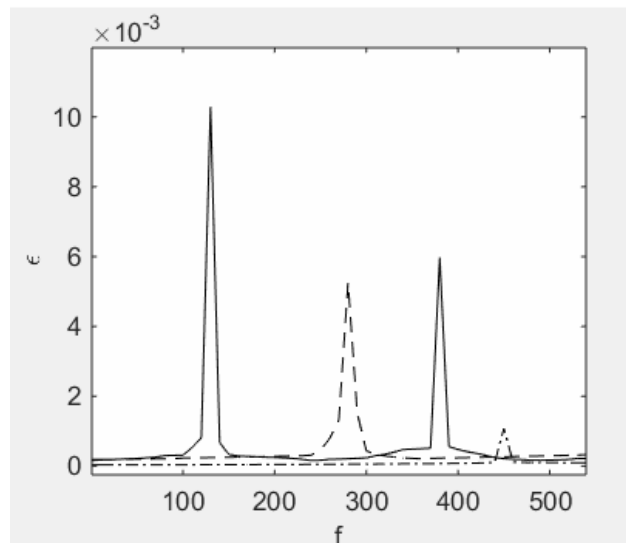


Рис. 2. Залежності амплітуди деформації ϵ_a від частоти f (Гц) при різних температурах.

Перші резонанси досягаються при наступних частотах:

1) $T = 5^\circ\text{C}$, $f = 448,46$ Гц

2) $T = 20^\circ\text{C}$, $f = 280,89$ Гц

3) $T = 35^\circ\text{C}$, $f = 192,69$ Гц

4. Висновки

Дослідження проводяться поблизу верхнього кінця стержня, де сильно проявляються механічні характеристики матеріалу. З графіку амплітудно-частотної характеристики бачимо, що зі збільшенням температури перший резонанс досягається швидше, тобто на менших частотах, що відповідає теорії пружності, так як зі збільшенням температури значення модуля накопичення E' зменшується, що відповідає зменшенню жорсткості матеріалу. Нам відомо, що при збільшенні температури модуль втрат E'' також зменшується, що відповідає зменшенню в'язкості матеріалу. З амплітудно-частотної характеристики помітно, що значення амплітуди напруження σ_a на перших резонансах зі зростанням температури збільшується, а згідно з теорією пружності це і означає зменшення в'язкості матеріалу.

Отже, бутилкаучук є стійким гумоподібним матеріалом, а результати, отримані скінченно-елементним моделюванням, підтверджуються загальною теорією пружності.

Список використаних джерел

References

1. *Snowdon J. C. Vibration and shock in damped mechanical systems* / J. C. Snowdon. – New York: The Pennsylvania State University, 1968. – 486 p.
2. *Behnke R. Thermo-mechanically coupled investigation of steady state rolling tires by numerical simulation and experiment* / R. Behnke, M. Kalishke – *International Journal of Non-Linear Mechanics*. – 2015. – 68. – С. 101–131.
3. *Карнаухов В. Г. Термомеханика предварительно деформированных вязкоупругих тел* / В. Г. Карнаухов, Б.П. Гуменюк. – Киев: Наук. думка, 1990. – 304 с.
4. *Карнаухов В. Г. Влияние предварительного деформирования на резонансные колебания и диссипативный разогрев вязкоупругого цилиндра конечной длины* / В.Г. Карнаухов, И.К. Сенченков, О.П. Червинко // *Прикладная механика*. – 1997. – 33, № 1. – С. 39 – 42.
5. *Nashif A. D. Vibration Damping* / A. D. Nashif, D. I. Jones, J. P. Henderson – New York: A Wiley-Interscience Publication. – 1985. – 448 p.
6. *Карнаухов В. Г. Термомеханическое поведение вязкоупругих тел при гармоническом нагружении* / В. Г. Карнаухов, И. К. Сенченков, Б. П. Гуменюк. – Киев: Наук. думка, 1985. – 288 с.
7. *Astarita G. Thermodynamics of dissipative materials with entropic elasticity* / G. Astarita – *Polymer Engineering & Sci.* – 1974. – 14, № 10. – С. 730 – 733.
8. *Babra R. C. Thermodynamics of simple materials of differential type* / R. C. Babra – *J. Mech.* – 1976. – 15, № 3. – С. 457 – 466.
9. *Freakley P. K. Theory and practice of engineering with rubber* / P. K. Freakley, A. R. Payne – London: Applied Science Publishers, 1978. – 667 p.
10. *Anderson V. W. Damping and fatigue properties of magnesium and magnese-copper alloys proposed as new high damping materials* / V. W. Anderson, B. J. Lazan. – Minnesota: Internal rept., Aero Library. – 1957. – 243 p.
11. *Goodman J. Mechanics applied to engineering* / J. Goodman. – London: Longmans-Green, 1899. – 148 p.
1. SNOWDON, J. C. (1968) *Vibration and shock in damped mechanical systems*. New York: The Pennsylvania State University.
2. BEHNKE, R. and KALISKE, M. (2015) Thermo-mechanically coupled investigation of steady state rolling tires by numerical simulation and experiment. *International Journal of Non-Linear Mechanics*. 68. p. 101–131.
3. KARNAUKHOV, V. G., GUMENUK, B. P. (1990) *Termomekhanika predvaritel'no deformirovannykh vyazkoupругikh tel*. Kiev: Naukova dumka.
4. KARNAUKHOV, V. G., SENCHENKOV, I. K., and CHERVINKO, O. P. (1997) *Vliyaniye predvaritel'nogo deformirovaniya na rezonansnyye kolebaniya i disipativnyy razogrev vyazkoupругogo tsilindra konechnoy dliny*. *Applied mechanics*. 33(1). p. 39 – 42.
5. NASHIF, A. D., JONES, D. I., and HENDERSON, J. P. (1985) *Vibration Damping*. New York: A Wiley-Interscience Publication.
6. KARNAUKHOV, V. G., SENCHENKOV, I. K., and CHERVINKO, O. P. (1985) *Termomekhanicheskoye povedeniye vyazkoupругikh tel pri garmonicheskoye nagruzhenii*. Kiev: Naukova dumka.
7. ASTARITA, G. (1974) Thermodynamics of dissipative materials with entropic elasticity. *Polymer Engineering & Sci.* 14 (10). p. 730 – 733
8. BABRA, R. C. (1976) Thermodynamics of simple materials of differential type. *J. Mech.* 15(3). p. 457 – 466.
9. FREAKLEY, P. K. and PAYNE, A. R. (1978) *Theory and practice of engineering with rubber*. – London: Applied Science Publishers.
10. ANDERSON, V. W., LAZAN, B. J. (1957) *Damping and fatigue properties of magnesium and magnese-copper alloys proposed as new high damping materials*. Minnesota: Internal rept., Aero Library.
11. GOODMAN, J. (1899) *Mechanics applied to engineering*. London: Longmans-Green.

Надійшла до редколегії 28.10.18

УДК 519.9

Петрова Т.О.¹, к.ф.-м.н., доц.

**Один контрприклад для q -опуклого
наближення функцій, що мають дробову
похідну, при $r \in (3,4)$ і $q=3$**

¹Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4е,
e-mail: tamarapetrova2703@gmail.com

Petrova T. O.¹, PhD in Ph.-mat.s., As. Prof

**One counterexample for q -convex
approximation of function with fractional
derivatives, $r \in (3,4)$ and $q=3$**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Acad. Glushkova av., 4-e
e-mail: tamarapetrova2703@gmail.com

Досліджується питання наближення функцій $f \in W^r[0,1] \cap \Delta^3, r \in (3,4)$ алгебраїчними
поліномами $p_n \in \Pi_n \cap \Delta^3$. Побудовано контрприклад, який показує, що для
 $f \in W^r[0,1] \cap \Delta^3, r \in (3,4)$ оцінка $|f(x) - p_n(x)| \leq c \frac{1}{n^2} (\sqrt{x(1-x)})^r, x \in [0,1]$ є невірною.

Ключові слова: наближення функції, простір Соболева, алгебраїчний поліном, монотонна
функція, q -опукла функція.

We discuss whether or not it is possible to have interpolatory estimates in the approximation of a
function $f \in W^r[0,1]$ by polynomials. The problem of positive approximation is to estimate the pointwise
degree of approximation of a function $f \in C^r[0,1] \cap \Delta^0$ where Δ^0 is the set of positive functions on $[0,1]$.
Estimates of the form (1) for positive approximation are known ([1],[2]). The problem of monotone
approximation is that of estimating the degree of approximation of a monotone nondecreasing function by
monotone nondecreasing polynomials. Estimates of the form (1) for monotone approximation were proved in
[3],[4],[8]. In [3],[4] is consider $r \in \mathbb{N}, r > 2$. In [8] is consider $r \in \mathbb{R}, r > 2$. It was proved that for
monotone approximation estimates of the form (1) are fails for $r > 2, r \in \mathbb{R}$. The problem of convex
approximation is that of estimating the degree of approximation of a convex function by convex polynomials.
The problem of convex approximation is that of estimating the degree of approximation of a convex function
by convex polynomials. The problem of convex approximation is consider in ([5],[6]). In [5] is consider
 $r \in \mathbb{N}, r > 2$. In [6] is consider $r \in \mathbb{R}, r > 2$. It was proved that for convex approximation estimates of the
form (1) are fails for $r > 2, r \in \mathbb{R}$. In [10] is consider $r \in \mathbb{R}, r > 4$. It was proved that for
 $f \in W^r[0,1] \cap \Delta^3, r > 4$ estimate (1) is not true. In this paper the question of approximation of function
 $f \in W^r[0,1] \cap \Delta^3, r \in (3,4)$ by algebraic polynomial $p_n \in \Pi_n \cap \Delta^3$ is consider. It is proved, that for
 $f \in W^r[0,1] \cap \Delta^3, r \in (3,4)$, estimate (1) is not true, generally speaking.

Key Words: approximation of function, Sobolev space, algebraic polynomial, monotone function,
 q -convex function.

Статтю представив доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України
Перестюк М.О.

Вступ

Нехай $W^r[0,1], r \in \mathbb{N}$ клас функцій $f \in C[0,1]$,
таких, що мають абсолютно неперервну $(r-1)$

похідну і $|f^{(r)}(x)| \leq 1$ майже скрізь на $[0,1]$.
Теляковський [1] для $r=1$ та Гопенгауз для
 $r \in \mathbb{N}$ [2] посилили пряму теорему Нікольського
– Тімана довівши, що кожен функцію
 $f \in W^r[0,1]$ можна наблизити алгебраїчним
многочленом p_n степеня $< n$ так, що

$$|f(x) - p_n(x)| \leq c(r) \left(\frac{\sqrt{x(1-x)}}{n} \right)^r, n > r \quad (1)$$

де c - абсолютна стала.

DeVore та Yu [3] довели, що при $r=1,2$ оцінка
(1) справедлива і при наближенні монотонної
функції монотонним многочленом. А саме, якщо
монотонна функція $f \in W^r[0,1]$, то існує
монотонний многочлен p_n , такий, що має місце
(1). В роботі GLSW [4] доведено, що для
натурального $r > 2$ оцінка (1), взагалі кажучи,
невірна.

Для опуклого наближення при $r > 2, r \in \mathbb{N}$
доведено [5], що оцінка (1) також є невірною.

Для $r \in \mathbb{R}$ введемо клас функцій $W^r[0,1]$, таких,
що $D_{0+}^{r-1} f$ абсолютно неперервна і $|D_{0+}^r f| \leq 1$
майже скрізь на $[0,1]$ (тут $D_{0+}^{r-1} f$ - лівостороння
дробова похідна [1]). Будемо позначати через
 Π_n - множину всіх алгебраїчних поліномів
степеня $\leq n$ і через Δ^3 множину функцій, які
мають опуклу вгору першу похідну на $[0,1]$. В
роботі [9] було доведено, що при
 $r > 2, r \in \mathbb{N}$ оцінка (1) є невірною для класу
функцій $W^r[0,1] \cap \Delta^3$.

В роботі [10] доведено, що при
 $q=3$ і $r > 4, r \in \mathbb{R}$, оцінка (1) також є невірною
для класу функцій $W^r[0,1] \cap \Delta^3$.

Основним результатом роботи є теорема, яка
узагальнює результат роботи [10] на класи
 $W^r[0,1] \cap \Delta^3$ з $r \in (3;4)$.

Основний результат.

Теорема. Нехай $r \in (3,4)$. Тоді для кожного
 $n \in \mathbb{N}$ існує функція $F = F_{r,n} \in W^r[0,1] \cap \Delta^3$
така, що для кожного многочлена $p_n \in \Pi_n \cap \Delta^3$

або

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{|F(x) - p_n(x)|}{\varphi^r(x)} = +\infty \quad (2)$$

або

$$\lim_{x \rightarrow 1} \frac{|F(x) - p_n(x)|}{\varphi^r(x)} = +\infty, \quad (3)$$

де $\varphi(x) = \sqrt{x(1-x)}$.

Доведення: Нехай $r \in (3,4)$ і $m = [r] + 1 = 4$.

Розглянемо функцію:

$$f(x) = \begin{cases} -\frac{(b-x)^4}{4!} + b^4(x+7) + \frac{13b^4}{4}(1+x)^{-2b^{-1}+4} - \frac{25b^4}{4}(1-x)^{b^{-1}+4}, & 0 \leq x \leq b \\ b^4(x+7) + \frac{13b^4}{4}(1+x)^{-2b^{-1}+4} - \frac{25b^4}{4}(1-x)^{b^{-1}+4}, & b < x \leq 1 \end{cases}$$

де $b = \frac{1}{468n^2}$.

Легко

бачити,

що

$$f(0) > 0, \quad f(1) \leq \frac{45b^4}{4}, \quad f'(0) > -\frac{b^3}{12}, \quad f'(1) > 0, \\ f''(0) > 0, \quad f''(1) > 0, \quad f'''(0) < 0, \quad f'''(b) < 0, \quad f'''(1) < 0 \\ \text{і } f^{(4)}(x) > 0 \text{ при } x \in (b,1], \quad f^{(4)} < 0, \text{ при } x \in [0,b].$$

Останні нерівності зумовлюють, що
 $f \in W^4[0,1] \cap \Delta^2$.

Далі розглянемо функцію $F(x) = -x^4 f(x)$.

Доведемо, що $F \in W^r[0,1] \cap \Delta^3$. Спочатку
покажемо, що $F \in \Delta^3$.

$$F'''(x) = -(x^4 f'''(x) + 12x^3 f''(x) + 36x^2 f'(x) + 24xf(x))$$

Очевидно, що $F'''(x) \leq 0 \Leftrightarrow$

$$G(x) = x^4 f'''(x) + 12x^3 f''(x) + 36x^2 f'(x) + 24xf(x) \geq 0$$

Нехай $x \in (b;1]$.

Тоді

$$G(x) \geq x^4 f'''(b) + 12x^2 f''(1) + 36xf'(b) + 24xf(1) \geq \\ \geq b^4 f'''(b) + 12b^2 f''(1) + 36bf'(b) + 24bf(1) \geq \\ \geq \frac{b^4}{e} (225 - 234e^{-1}) + b^5 \left(-26e^{-2} \frac{25}{4} e^{-1} + 228 \right) + \\ + 2^{\frac{2}{b}} b^4 (624 + 1248b) \geq 0.$$

Таким чином, $G(x) \geq 0$ і $F'''(x) \leq 0$, $x \in (b; 1]$

Нехай $x \in [0; b]$. З огляду на те, що $f'(0) < 0$ і $f'(b) > 0$, маємо, що $\exists x_0 \in (0, b): f'(x_0) = 0$.

Тоді точка $x = x_0$ є точкою мінімуму функції $f(x)$.

Зауважимо, що $\forall x \in [0, b]: f(x) \geq b^4$.

Таким чином отримаємо оцінку:

$$G(x) = x^4 f'''(x) + 12x^3 f''(x) + 36x^2 f'(x) + 24xf(x) \geq xb^4 \left(21 - \frac{6}{e^2} + \frac{25}{4e} \right) \geq 0, \quad x \in [0; b].$$

Ми довели, що $\forall x \in [0, 1]: F'''(x) \leq 0$.

З останньої нерівності випливає, що $F \in \Delta^3$.

За Теоремою 2.3 в роботі [1] маємо:

$$D_{0+}^r F(x) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{F^{(k)}(0)}{\Gamma(1+k-r)} x^{k-r} + \frac{1}{\Gamma(m-r)} \int_0^x \frac{F^{(m)}(t)}{(x-t)^{r-m+1}} dt = \sum_{k=0}^3 \frac{F^{(k)}(0)}{\Gamma(1+k-r)} x^{k-r} + \frac{1}{\Gamma(4-r)} \int_0^x \frac{F^{(4)}(t)}{(x-t)^{r-3}} dt$$

майже скрізь на $[0, 1]$.

Так як $F^{(k)}(0) = 0$ при $k = 0, 1, 2, 3$, то

$$D_{0+}^r F(x) = \frac{1}{\Gamma(4-r)} \int_0^x \frac{F^{(4)}(t)}{(x-t)^{r-3}} dt$$

майже скрізь на $[0, 1]$.

Очевидно, що $\exists c > 0, c \in \mathbb{R}$ така, що

$\forall x \in [0, 1]: |F^{(4)}(x)| \leq c$. Тоді

$$|D_{0+}^r F(x)| = \frac{c}{\Gamma(4-r)} \int_0^x \frac{dt}{(x-t)^{r-3}} = \frac{c}{\Gamma(4-r)} \frac{x^{4-r}}{4-r} \leq \frac{c}{(4-r)\Gamma(4-r)}.$$

Таким чином, $D_{0+}^r F(x)$ існує майже скрізь на $[0, 1]$. Очевидно, що

$$D_{0+}^{r-1} F(x) = \frac{1}{\Gamma(3-r)} \int_0^x \frac{F^{(3)}(t)}{(x-t)^{r-2}} dt$$

буде абсолютно неперервною. Таким чином, $F \in W^r[0, 1] \cap \Delta^3$.

Нехай існує многочлен $q_N \in \Delta^3$ і для якого умова (2) не виконується. Тоді, для деякої сталої B маємо:

$$|F(x) - q_N(x)| \leq B\varphi^r(x) \leq Bx^{r/2}, \quad 0 \leq x \leq b.$$

Звідси випливає, що $q_N(0) = F(0) = 0$ і $q'_N(0) = F'(0) = 0$. Тоді многочлен q_N має вигляд $q_N(x) = x^2 \cdot h_{N_1}(x)$, де h_{N_1} многочлен степеня $\leq N_1, N_1 \leq N$.

Розглянемо многочлен

$$\tilde{q}_N(x) = q_N(x) + f'(0)x + f(0) - x^2 \frac{|q''_N(0)|}{2}$$

Помітимо, що умова $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{|f(x) - \tilde{q}_N(x)|}{\varphi^4(x)} = \infty$ не

виконується і $\tilde{q}_N(0) = f(0)$, $\tilde{q}'_N(0) = f'(0)$.

Також зазначимо, що $\tilde{q}_N \in \Delta^2$ і $f \in W^4[0, 1] \cap \Delta^2$.

Як було доведено в [5], $|\tilde{q}_N(1)| \neq f(1)$, а саме $f(1) < |\tilde{q}_N(1)|$.

Далі розглянемо:

$$\tilde{q}_N(1) = q_N(1) + f'(0) + f(0) - \frac{|q''_N(0)|}{2}.$$

Припустимо, що $q_N(1) = -f(1)$.

Тоді

$$\begin{aligned} \tilde{q}_N(1) &= -f(1) + f'(0) + f(0) - \frac{|q''_N(0)|}{2} > \\ &> f(1) \Leftrightarrow -2f(1) + f'(0) + f(0) - \frac{|q''_N(0)|}{2} > 0 \\ &\Leftrightarrow -\frac{b^3}{12} + \frac{1031}{24}b^4 - \frac{|q''_N(0)|}{2} - 16b^4 - \frac{13b^4}{2} 2^{-\frac{2}{b}+4} > 0 \\ &\Leftrightarrow -\frac{b^3}{12} + \frac{647}{24}b^4 - \frac{13b^4}{2} 2^{-\frac{2}{b}+4} - \frac{|q''_N(0)|}{2} > 0 \end{aligned}$$

Очевидно, маємо суперечність.

Таким чином $q_N(1) \neq -f(1) = F(1)$.

Теорема доведена.

Зауваження.

Насправді, було доведено, що якщо перша рівність не виконується, то $F(1) \neq q_N(1)$.

Аналогічно, якщо друга не виконується, то $F(0) \neq q_N(0)$.

Висновки.

У роботі побудовано контрприклад, який показує, що оцінка (1) не може бути поширена на клас функцій $f \in W^r[0,1] \cap \Delta^3, r \in (3,4)$.

Список використаних джерел

1. Теляковский С.А. Две теоремы о приближении функций алгебраическими полиномами / С.А. Теляковский - Мат. сб. - 1966 - **13**, №79 – с.252-265
2. Gopengauz A.I., Pointwise estimates of Hermitian interpolation / A.I. Gopengauz - Constr. Approx. – 1994-9, №77 – p.34-43
3. DeVore R.A., Pointwise estimates for monotone polynomial approximation / DeVore R.A. and Yu X.M // Constr. Approx.–1985, №1–p.323–331.
4. Gonska H.H. Interpolatory pointwise estimates for polynomial approximations / H. H. Gonska, D. Leviatan, I. A. Shevchuk, and H. -J. Wenz // Constr. Approx. -2000-26, №16 – p.603–629.
5. Петрова Т.О., Контрприклад у інтерполяційному опуклому наближенні / Т. О. Петрова - праці Інституту математики НАН України «Математика та її застосування Теорія наближення функцій» -2005,№35 - с.107-112
6. Петрова Т.О., Один контрприклад для наближення функцій, що мають дробову похідну / Т. О. Петрова - Вісник Київського університету. Фізико - математичні науки - 2006 -5, №4 – с.113–118
7. Samko S. G., Fractional integrals and derivatives: theory and applications / S. G. Samko Kilbas A. A., and Marichev O.I. // Constr.Approx – 1987, №4 – p. 119-126
8. Петрова Т.О., Про поточкові інтерполяційні оцінки монотонного наближення функцій, що мають дробову похідну / Т. О. Петрова - Вісник Київського університету. Математика –Механіка-2003-2,№9-10 125–127.
9. Петрова Т.О., Про поточкові інтерполяційні оцінки монотонного наближення функцій, що мають дробову похідну / Т. О. Петрова Вісник Київського університету. Математика–Механіка-2002,№7-8– с.125–127
10. Петрова Т.О., Про поточкові інтерполяційні оцінки q-опуклого наближення функцій, що мають дробову похідну довільного дійсного порядку, $r > 4$ / Т. О. Петрова Вісник Київського університету імені Тараса Шевченка. Фізико-математичні науки-2017,№2– с.17–20

References

1. TELYAKOVSKIY S.A. (1966) Dve teoremy o priblizhenii funkciy algebraicheskimi polinomami, Mat. sb. 79, p.252-265
2. GOPENGAUZ A.I. (1994) Pointwise estimates of Hermitian interpolation 77, p.34-43
3. DeVore R.A. and YU X.M. (1985) Pointwise estimates for monotone polynomial approximation, Constr. Approx.,1 p.323–331.
4. H. H. GONSKA, D. LEVIATAN, I. A. SHEVCUK, and H. -J. WENZ (2000) Interpolatory pointwise estimates for polynomial approximations, Constr. Approx. 16, p.603–629.
5. PETROVA T.O., (2005) Kontrprzyklad u interpolyatsiinomu opuklomu nablyzhenni, Pratsi Instytutu matematyky NAN Ukrainy “Matematyka ta zastosuvannia. Teoriya nablyzhennia functsii”,35 p.107–112.
6. PETROVA T.O. (2006) Kontrprzyklad u interpolyacijnomu opuklomu nablyzhenni, praci Institutu matematiki NAN Ukrayini "Matematika ta yiyi zastosuvannia. Teoriya nablyzhennia funkcij 4, p.113–118
7. SAMKO S. G., KILBAS A. A., and MARICHEV O.I. (1987) Fractional integrals and derivatives: theory and applications, Constr.Approx 4, p.119-126
8. PETROVA T.O. (2003) Pro potochkovi interpolyacijni ocinki monotonного nablyzhennia funkcij, sho mayut drobovu pohidnu, Visnik Kiyivskogo universitetu. Matematika–Mehanika 9-10, p.125–127
9. PETROVA T.O. (2002) Pro potochkovi interpolyacijni ocinki monotonного nablyzhennia funkcij, sho mayut drobovu pohidnu, Visnik Kiyivskogo universitetu. Matematika–Mehanika 7-8, p.118–122
10. PETROVA T.O., Pro potochkovi interpolyacijni ocinki monotonного nablyzhennia funkcij, sho mayut drobovu pohidnu dovil'nogo diysnogo poryadku, $r > 4$ / Visnik Kiyivskogo universitetu imeni Tarasa Shevchenka . Fyzyko-matematychni nauky - 2017,№2– p.17–20

Надійшла до редколегії 14.11.18

УДК 532.5

Троценко Я. П., аспірант.

Y. P. Trotsenko, Ph.D. student.

Особливості потоку рідини крізь циліндричні порожнини

Properties of the fluid flow through cylindrical cavities

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Акад.
Глушкова, 4-е,
e-mail: yaroslav.p.trotsenko@gmail.com

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Acad. Glushkova av., 4-e,
e-mail: yaroslav.p.trotsenko@gmail.com

Досліджено течію в'язкої нестисливої рідини у циліндричному каналі з двома послідовно розташованими діафрагмами на основі чисельного розв'язання нестационарних рівнянь Нав'є-Стокса. Показано, що при певних параметрах течія рідини в області між діафрагмами нестационарна і характеризується наявністю нестійкого зсувного шару, у якому утворюється послідовний ряд кільцевих вихорів, що викликають стійкі періодичні автоколивання профілю швидкості в отворі другої діафрагми. При незмінних геометричних параметрах порожнини між діафрагмами можливі два стійкі режими автоколивань з різними частотами. Ці коливання характеризуються практично сталим числом Струхала зі зміною числа Рейнольдса. В залежності від діаметру порожнини можуть виникати три режими автоколивань.

Ключові слова: циліндрична порожнина, канал з діафрагмами, вихрові структури, автоколивання.

The flow of viscous incompressible fluid in a cylindrical duct with two serial diaphragms is studied by the numerical solution of unsteady Navier-Stokes equations. The discretization procedure is based on the finite volume method using the TVD scheme for the discretization of the convective terms and second order accurate in both space and time difference schemes. The resulting system of non-linear algebraic equations is solved by the PISO algorithm. It is shown that the fluid flow in the region between the diaphragms is non-stationary and is characterized by the presence of an unstable shear layer under the certain parameters. A series of ring vortices is formed in the shear layer that causes stable periodic self-sustained oscillations of the velocity profile in the orifice of the second diaphragm. Two stable modes of self-sustained oscillations with different frequencies are possible with constant geometric parameters of the cavity between the diaphragms. These oscillations are characterized by an almost constant Strouhal number with a change in the Reynolds number. There can be three self-sustained oscillation modes depending on the cavity diameter.

Key Words: cylindrical cavity, duct with diaphragms, vortex structures, self-sustained oscillations.

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

1. Вступ

Течія рідини чи газу в нерегулярних каналах відрізняється складною неоднорідною структурою і може бути нестационарною. При певних умовах це може призвести до виникнення акустичних коливань. Такими явищами цікавляться вже давно, ще у 1854 році Зондхаус спостерігав виникнення тонального звуку при натіканні струменя на круговий отвір в пластині (hole tone) [1]. У другій половині XX століття відновлюються більш детальні експериментальні дослідження подібних систем, зокрема і потоків у каналах зі звуженнями, наприклад [2,3]. В наш час даній проблемі також приділяється значна увага як в експериментальному плані, так і в

теоретичному. Стрімкий розвиток комп'ютерної техніки та чисельних методів дає можливість досліджувати дану проблему за допомогою чисельних експериментів, зокрема і прямого чисельного моделювання [4,5].

Метою даної роботи є дослідження течії рідини в напівнескінченному циліндричному каналі з двома послідовно розташованими діафрагмами при різних діаметрах порожнини, утвореної цими діафрагмами, а саме: моделювання відповідних процесів та чисельний розрахунок, аналіз структури потоку в області між діафрагмами і визначення характеристик автоколивальних процесів в залежності від відношення діаметрів порожнини та отворів діафрагм.

2. Постановка задачі.

Розглядається течія рідини у напів-нескінченному циліндричному каналі з двома послідовно розташованими діафрагмами. При цьому порожнина, утворена діафрагмами, може набувати різного діаметру. В повздовжньому перетині каналу контури діафрагм в околі отворів мають форму півкола (рис. 1). Вважається, що поверхні каналу та діафрагм нерухомі й абсолютно жорсткі. Течія розглядається при швидкостях значно менших за швидкість звуку в середовищі. Потік рідини з густиною ρ потрапляє в розрахункову область з рівномірною швидкістю V_1 через ліву межу $x=0, 0 \leq R < D_1/2$ та покидає її через праву $x=L, 0 \leq R < D_1/2$. Також припускається, що рух рідини в порожнині між діафрагмами є близьким до осесиметричного, на що вказують експериментальні дослідження.

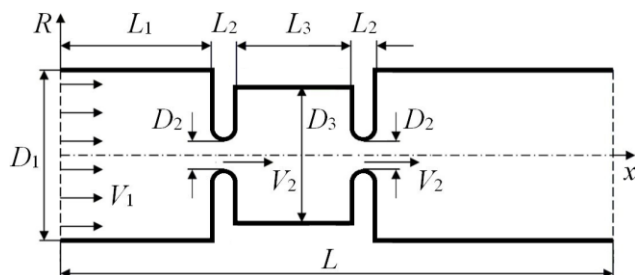


Рис. 1. Геометрія задачі

Значення геометричних параметрів для обчислень обираються такими: $D_2 = 6.35$ мм, $D_1/D_2 = 8.16$, $L_2/D_2 = 1$, $L_3/D_2 = 6$. Величина діаметру порожнини між діафрагмами обирається з діапазону $D_3/D_2 \in [1.29, 16.32]$. Розмір області вгору за потоком від першої діафрагми – $L_1/D_2 = 12$, загальна довжина розрахункової області – $L/D_2 = 92$. Кінематична в'язкість середовища $\nu = 1.5 \cdot 10^{-5}$ м²/с відповідає в'язкості повітря при температурі 20°C.

Відомо, що розміри джерел звуку, що породжується потоком, тобто розміри діафрагм та порожнини між ними, – малі в порівнянні з довжиною звукової хвилі [2]. Тому приймаються наступні гіпотези: потужність збуджених потоком акустичних коливань є значно меншою за потужність самого потоку, і породжений звук не впливає на його характер. У зв'язку з цим задача розв'язується в межах моделі в'язкої нестисливої рідини.

Основним параметром задачі є число Рейнольдса, яке можна визначити як

$Re = V_2 D_2 / \nu$, де V_2 – швидкість потоку в отворах діафрагм, осереднена по поперечному перетину. Тоді масштабом довжини є діаметр отвору діафрагми D_2 , швидкості – швидкість V_2 , часу – величина D_2 / V_2 , а масштабом тиску – подвоєний швидкісний напір ρV_2^2 .

В межах прийнятої моделі процес описується системою нестационарних рівнянь Нав'є-Стокса, що в безрозмірних величинах у векторній формі мають вигляд

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

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (2)$$

де p – скалярне поле тиску, $\mathbf{U}$ – векторне поле швидкості.

Крайові умови для швидкості: рівномірний потік на вході в розрахункову область, умова прилипання на твердих поверхнях, рівність нулю нормального градієнту на виході з розрахункової області:

$$\mathbf{U}|_{x=0} = (V_1, 0, 0), \quad \mathbf{U}|_{\Sigma} = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x}|_{x=L} = 0. \quad (3)$$

Для тиску задається рівність нулю нормального градієнту на всій межі розрахункової області окрім виходу з неї, де обирається постійний тиск:

$$\frac{\partial p}{\partial x}|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}}|_{\Sigma} = 0, \quad p|_{x=L} = 0. \quad (4)$$

В початковий момент середовище знаходиться у стані спокою:

$$\mathbf{U}(t=0) = 0, \quad p(t=0) = 0. \quad (5)$$

3. Чисельний алгоритм розв'язання задачі.

Розв'язання поставленої задачі проводиться чисельно за методом скінченних об'ємів. Внаслідок припущення щодо осьової симетрії потоку в якості розрахункової області приймається половина повздовжнього перетину каналу. Для дискретизації області використовується неортогональна блочно-структурована сітка зі згущенням вузлів в отворах діафрагм та при наближенні до їх поверхонь. Кількість контрольних об'ємів вздовж поперечного перетину діафрагми – 82 з найменшим кроком біля поверхні – $3.2 \cdot 10^{-5}$ м, загальна кількість об'ємів змінювалась від 149234 до 216976 в

залежності від діаметру порожнини між діафрагмами.

Для розрахунку об'ємних інтегралів по контрольному об'єму застосовується узагальнена процедура Гауса. Для інтерполяції конвективних членів використовується TVD форма центрально-різницевої схеми для векторного поля з обмежувачем потоку типу Sweby [6]. Нормальні градієнти швидкості на поверхні елементів обчислюються зі значень швидкості в центроїдах сусідніх комірок за схемою другого порядку. На неортогональних ділянках сітки використовується процедура корекції похибки, викликані неортогональністю [7]. В якості схеми дискретизації похідної за часом обирається неявна триточкова несиметрична схема другого порядку з різницями назад.

Зв'язаний розрахунок поля швидкості і тиску проводиться за допомогою процедури PISO [8]. Для розв'язання отриманої системи лінеаризованих алгебраїчних рівнянь використовуються ітераційні розв'язники, що побудовані на основі методу спряжених/біспряжених градієнтів для симетричних та асиметричних матриць. В якості передобумовлення обрано спрощені схеми неповної факторизації Холецкого та неповної LU-факторизації для симетричних і асиметричних матриць відповідно [9].

Задача розв'язується за допомогою бібліотек тулбоксу з відкритим кодом OpenFOAM з використанням обчислювальних потужностей комплексу СКІТ Інституту кібернетики НАН України. Для розпаралелювання обчислень використовується технологія MPI та метод декомпозиції області розв'язання [8]. Більш детально алгоритм чисельного розв'язання та обґрунтування вибору відповідних методів розглянуто у роботі [10].

З метою контролю точності обчислень поле швидкості чисельно інтегрується по поперечних перетинах отворів діафрагм S_1 ($x = L_1 + L_2/2$, $0 \leq R < D_2/2$) та S_2 ($x = L_1 + 3L_2/2 + L_3$, $0 \leq R < D_2/2$). Це дозволяє контролювати точність виконання умови нестисливості середовища, яку можна подати у вигляді

$$\left| \frac{4 \int_{S_i} U_x ds - \pi D_1^2 V_1}{\pi D_1^2 V_1} \right| < \delta, \quad i = 1, 2. \quad (6)$$

Для результатів, представлених у даній роботі, відносна похибка δ не перевищує $3.3 \cdot 10^{-3}$.

4. Аналіз результатів обчислень.

В роботі [11] було показано, що при відношенні діаметрів порожнини та отворів діафрагм рівному $D_3/D_2 = 8.16$ в діапазоні чисел Рейнольдса $Re \in [2687, 4228]$ течія рідини в області між діафрагмами є нестационарною. Встановлюється циркуляційний рух, який переносить частину кінетичної енергії струменя з області отвору другої діафрагми вгору за потоком. На межі струменя та порожнини утворюється кільцевий зсувний шар, у якому виникає послідовний ряд кільцевих вихорів, що викликають автоколивання профілю повздовжньої швидкості потоку U_x в отворі другої діафрагми S_2 . На рис. 2 зображено поле завихреності в повздовжньому перетині каналу при $Re = 3946$ з частотою коливань $f_1 = 772.4$ Гц. Ці автоколивання можуть бути джерелом звуку в каналі та дають змогу оцінити його частоту.

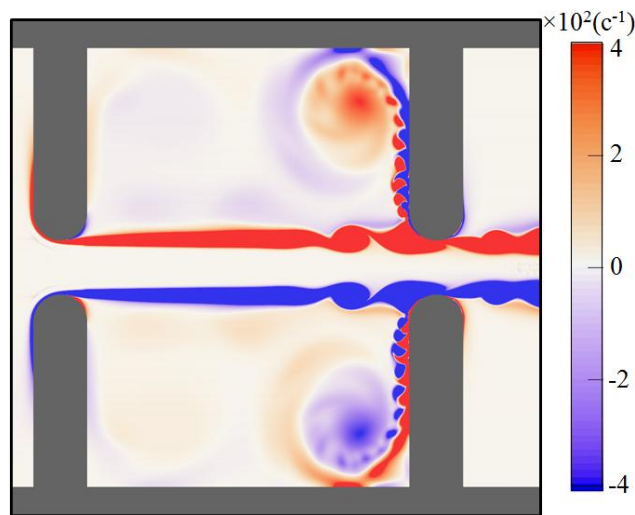


Рис. 2. Поле завихреності при $D_3/D_2 = 8.16$

Також було отримано залежність числа Струхаля $St = fD_2/V_2$ коливань профілю повздовжньої швидкості U_x в отворі другої діафрагми S_2 від числа Рейнольдса Re (рис. 3). При числах Рейнольдса більших за $Re \approx 3312$ в даній системі можливі два стійкі режими автоколивань з різними частотами. При цьому обидва режими характеризуються практично сталими числами Струхаля $St_1 \in [0.518, 0.531]$ та $St_2 \in [0.579, 0.591]$ зі зміною числа Рейнольдса Re . При числах Рейнольдса більших за $Re \approx 4228$ внаслідок дестабілізації циркуляційного руху автоколивання стають багаточастотними і характер звуку наближається до шумового.

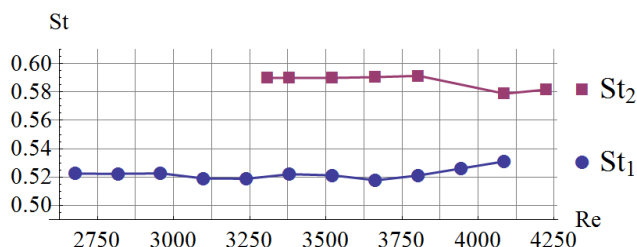


Рис. 3. Число Струхала St коливань U_x в перетині S_2 як функція числа Рейнольдса Re

Розглянемо, як зміниться поведінка системи при зміні діаметру порожнини між діафрагмами для випадку $Re = 3946$. При збільшенні діаметру до $D_3/D_2 = 16.32$ великий кільцевий вихор біля другої діафрагми так само як і у випадку $D_3/D_2 = 8.16$ розширюється та займає положення в глибині порожнини. При цьому, він займає більше простору по довжині порожнини. Частота утворення вихорів у зсувному шарі $f_1 = 775.7$ Гц практично не змінюється і відповідає першому режиму автоколивань.

Внаслідок зменшення діаметру порожнини до $D_3/D_2 = 5.44$ вихор біля другої діафрагми також зменшується в розмірі, а його завихреність збільшується (рис. 4). Водночас він не стабілізується остаточно та не розширюється вглиб порожнини, а залишається близько до струменя. З його поверхні періодично зриваються об'єми рідини протилежної завихреності, які далі рухаються проти потоку. Частота коливань $f_1 = 759.2$ Гц в цьому випадку несуттєво зменшується, що не впливає на характер потоку.

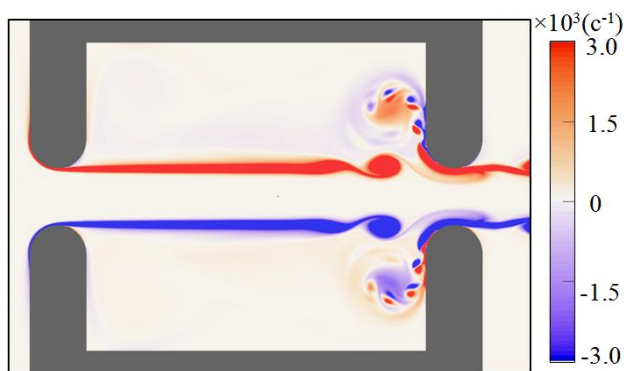


Рис. 4. Поле завихреності при $D_3/D_2 = 5.44$

Але при невеликому зменшенні діаметру порожнини до $D_3/D_2 = 5.1$ відбувається стрибок частоти до другого режиму автоколивань $f_2 = 869.4$ Гц. Отже, зростає частота знесення вихорів у отвір діафрагми, внаслідок чого збурення в околі отвору стають меншими. Потік енергії в циркуляційному русі стає більш

регулярним і великий кільцевий вихор розширюється вглиб порожнини та стабілізується (рис. 5).

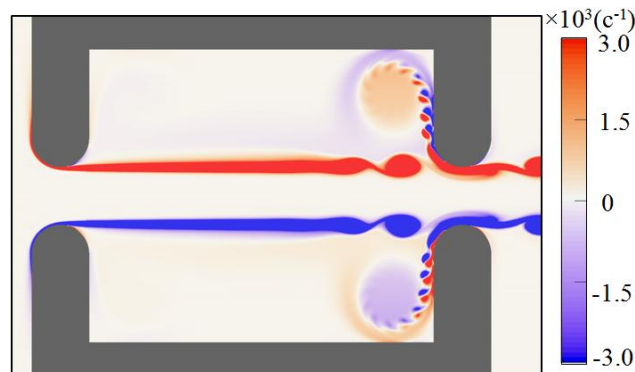


Рис. 5. Поле завихреності при $D_3/D_2 = 5.1$

При зменшенні діаметру порожнини до $D_3/D_2 = 3.74$ структура потоку суттєво змінюється. У зв'язку зі зменшенням діаметру порожнини великий кільцевий вихор біля другої діафрагми тепер безпосередньо збурює зсувний шар, і в порожнині з'являється другий вихор тієї ж завихреності вище за потоком (рис. 6). Точка утворення вихорів у зсувному шарі тепер знаходиться практично біля отвору діафрагми. Також відбувається ще один стрибок частоти до третього режиму автоколивань $f_3 = 1040$ Гц. При цьому амплітуда коливань швидкості U_x в отворі другої діафрагми S_2 значно зменшується.

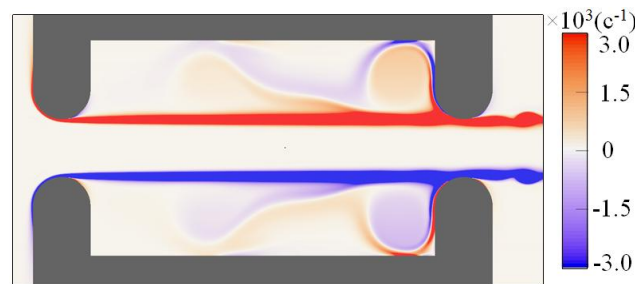


Рис. 6. Поле завихреності при $D_3/D_2 = 3.74$

При зменшенні діаметру порожнини до $D_3/D_2 = 2$, тобто до заокругленої частини діафрагми, вихори продовжують зменшуватись у розмірі, і другий вихор наближається до першого (рис. 7). Проте частота $f_3 = 1048$ Гц та амплітуда коливань залишаються практично незмінними.

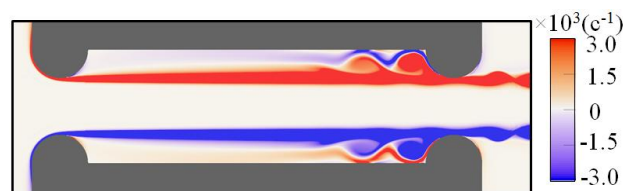


Рис. 7. Поле завихреності при $D_3/D_2 = 2$

При подальшому зменшенні діаметру амплітуда коливань поступово спадає, доки утворення вихорів у зсувному шарі не припиниться зі зникненням циркуляційного руху при $D_3/D_2 \approx 1.29$ (рис. 8).

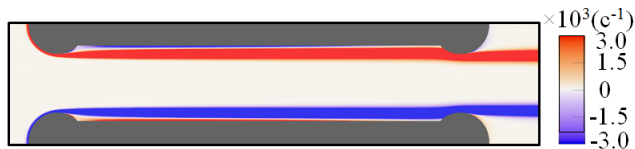


Рис. 8. Поле завихреності при $D_3/D_2 \approx 1.29$

Отже, можна побудувати графік залежності числа Струхала St коливань профілю швидкості U_x в отворі другої діафрагми S_2 від відношення діаметрів порожнини і отворів діафрагм D_3/D_2 (рис. 9). Можна виділити три режими автоколивань з практично сталими числами Струхала: $St_1 \in [0.515, 0.528]$, $St_2 \in [0.589, 0.602]$, $St_3 \in [0.701, 0.717]$.

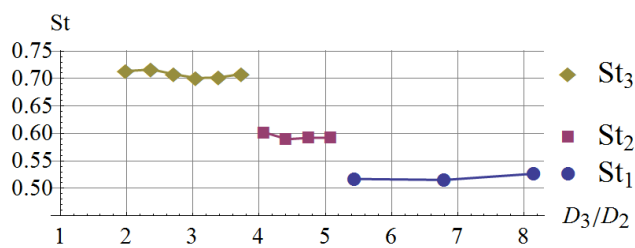


Рис. 9. Число Струхала St коливань U_x в перетині S_2 як функція відношення D_3/D_2

На рис. 11 зображені типові амплітудно-частотні спектри коливань повздовжньої швидкості потоку U_x в точці M ($x = L_1 + 3L_2/2 + L_3$, $R=0$) перетину отвору другої діафрагми S_2 для трьох режимів автоколивань при $Re = 3946$ (всі точки перетину мають однакову частоту коливань). Як видно з рис. 11, a , в системі дійсно встановились періодичні коливання з яскраво вираженою основною частотою f_1 . Також у спектрі присутні другорядні гармоніки, проте їх амплітуди є значно меншими. При зменшенні діаметру порожнини між діафрагмами, після першого стрибка частоти до f_2 амплітуда другорядних складових спектру зменшується, оскільки великий кільцевий вихор біля другої діафрагми стабілізується (рис. 11, b). Після другого стрибка частоти до f_3 амплітуда основної частоти значно зменшується, а вищі гармоніки практично не спостерігаються (рис. 11, $в$).

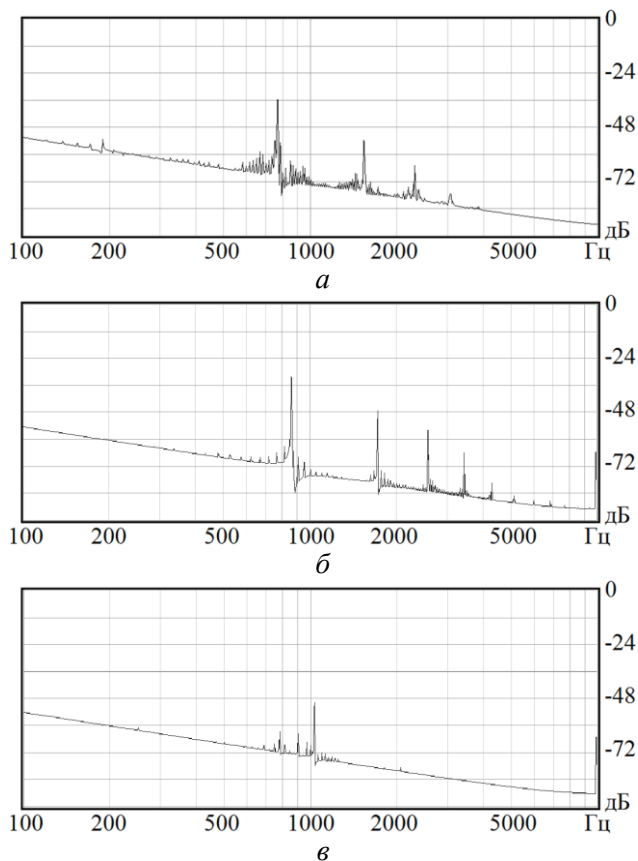


Рис. 11. Спектри коливань U_x в точці M при a – $D_3/D_2 = 8.16$, b – $D_3/D_2 = 5.1$, $в$ – $D_3/D_2 = 3.74$

5. Висновки

Проведено чисельне моделювання течії в'язкої нестисливої рідини в циліндричному каналі з двома послідовно розташованими діафрагмами. Проведено аналіз особливостей руху середовища в області між діафрагмами залежно від відношення діаметрів порожнини та отворів діафрагм. Показано, що в певному діапазоні чисел Рейнольдса у зсувному шарі утворюється послідовний ряд вихорів, що спричиняють періодичні коливання профілю повздовжньої швидкості в отворі другої діафрагми.

При незмінних геометричних параметрах порожнини між діафрагмами можливі два стійкі режими автоколивань з різними частотами. Обидва режими автоколивань характеризуються практично сталим числом Струхала зі зміною числа Рейнольдса. Встановлено, що залежно від діаметру порожнини можуть виникати три режими автоколивань. При третьому режимі в порожнині з'являється другий великий кільцевий вихор, а амплітуда коливань повздовжньої швидкості в отворі другої діафрагми значно спадає.

Список використаних джерел

1. Sondhauss C. Ueber die beim Ausstromen der Luft entstehenden Tone / C. Sondhauss // *Annalen Der Physik Und Chemie*. – 1854. – **167**(1). – P. 126–147.
2. Wilson T.A. Experiments on the fluid mechanics of whistling / T.A. Wilson, G.S. Beavers, M.A. DeCoster, D.K. Holger, M.D. Regenfuss // *J. Acoust. Soc. Am.* – 1971. – **50**, Iss. 1B. – P. 366–372.
3. Rockwell D. Self-generation of organized waves in an impinging turbulent jet at low Mach numbers / D. Rockwell, A. Schachenmann // *J. Fluid Mech.* – 1982. – **117**. – P. 425–441.
4. Nakiboglu G. Aeroacoustic power generated by a compact axisymmetric cavity: prediction of self-sustained oscillation and influence of the depth / G. Nakiboglu, H.B.M. Manders, A. Hirschberg // *J. Fluid Mech.* – 2012. – **703**. – P. 163–191.
5. Matsuura K. A throttling mechanism sustaining a hole tone feedback system at very low Mach numbers / K. Matsuura, M. Nakano // *J. Fluid Mech.* – 2012. – **710**. – P. 569–605.
6. Sweby P.K. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws / P.K. Sweby // *J. Numer. Anal.* – 1984. – **21**(5) – P. 995–1011.
7. Jasak H. Error analysis and estimation for the finite method with applications to fluid flows. Ph.D. Thesis / H. Jasak. – London: Imperial College, 1996. – 394 p.
8. Ferziger J.H. Computational methods for fluid dynamics / J.H. Ferziger, M. Peric. – Berlin: Springer, 2002. – 424 p.
9. Barrett R. Templates for the solution of linear systems: Building blocks for iterative methods, 2nd Edition / R. Barrett, M. Berry, T.F. Chan, J. Demmel, J.M. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, H. Van der Vorst. – Philadelphia: SIAM, 1994. – 107 p.
10. Малюга В.С. Численное исследование течения в канале с двумя последовательно расположенными стенозами. Алгоритм решения / В.С. Малюга // *Прикл. гидромех.* – 2010. – **12**, № 4. – С. 45–62.
11. Троценко Я.П. Формування автоколивань потоком рідини в циліндричному каналі зі стенозами / Я.П. Троценко // *Збірник праць. Акустичний симпозіум «КОНСОНАНС – 2017»*. Київ, ІГМ НАН України, 2–3 жовтня 2017 р. – Київ, 2017. – С. 138–143.

References

1. SONDHAUSS, C. (1854). Ueber die beim Ausstromen der Luft entstehenden Tone. *Annalen Der Physik Und Chemie*, 167 (1), p.126–147.
2. WILSON, T. A., BEAVERS, G. S., DECOSTER, M. A., HOLGER, D. K. and REGENFUSS, M. D. (1971). Experiments on the fluid mechanics of whistling. *J. Acoust. Soc. Am.*, 50 (1B), p.366–372.
3. ROCKWELL, D. and SCHACHENMANN, A. (1982) Self-generation of organized waves in an impinging turbulent jet at low Mach numbers. *J. Fluid Mech.*, 117, p.425–441.
4. NAKIBOGLU, G., MANDERS, H. B. M. and HIRSCHBERG, A. (2012). Aeroacoustic power generated by a compact axisymmetric cavity: prediction of self-sustained oscillation and influence of the depth. *J. Fluid Mech.*, 703, p.163–191.
5. MATSUURA, K. and NAKANO, M. (2012) A throttling mechanism sustaining a hole tone feedback system at very low Mach numbers. *J. Fluid Mech.*, 710, p.569–605.
6. SWEBY, P. K. (1984). High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *J. Numer. Anal.*, 21 (5), p.995–1011.
7. JASAK, H. (1996). *Error analysis and estimation for the finite method with applications to fluid flows*. Ph.D. Thesis. London: Imperial College.
8. FERZIGER, J. H. and PERIC, M. (2002). *Computational methods for fluid dynamics*. Berlin: Springer.
9. BARRETT, R., BERRY, M., CHAN, T. F., DEMMEL, J., DONATO, J. M., DONGARRA, J., EIJKHOUT, V., POZO, R., ROMINE, C. and VAN DER VORST, H. (1994). *Templates for the solution of linear systems: Building blocks for iterative methods*, 2nd Ed. Philadelphia: SIAM.
10. MALYUGA, V. S. (2010). Chislennoye issledovaniye techeniya v kanale s dvumya posledovatel'no raspolozhennymi stenozyami. Algoritm resheniya. *Prikl. Gidromeh.*, 12 (4), p.45–62.
11. TROTSSENKO, Y. P. (2017). Formuvannia avtokolyvan' potokom ridyny v tsylindrychnomu kanali zi stenozyami. *Zbirnyk prats'. Akustychnyi sympozium "KONSONANS – 2017"*. Kyiv, IGM NAN Ukrainy. 2–3 zhovtnia 2017, p.138–143.

Надійшла до редколегії 22.11.18

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 519.63

Н.А. Алієв, проф., д.м.н.
Н.С. Ібрагімов, проф., д.м.н.
А.М. Маммадзада, докт.

**Розв'язок задачі Коші та крайової задачі
для рівняння третього порядку з
дискретними адитивно-мультіпліка-
тивно-поверативними похідними**

Ланкаранський державний університет,
пр-т Генерала Ази Асланова, 50, Ланкаран,
Азербайджанська Республіка, Az 4200
e-mail: natiq_ibrahimov@mail.ru
mammadzada.aygun@mail.ru

N.A. Aliyev, Dr.Sci.(Math.), Prof.
N.S. Ibrahimov, Dr.Sci.(Math.), Prof.
A.M. Mammadzada, doct. stud.

**Solution of Cauchy and boundary problems
for the third compilation discrete additive-
multiplicative-powerative derivative equation**

Lankaran State University,
General Hazi Aslanov Ave., 50, Lankaran,
Azerbaijan Republic, Az 4200
e-mail: natiq_ibrahimov@mail.ru
mammadzada.aygun@mail.ru

Відомо, що дослідження розв'язків задачі Коші та крайової задачі для рівнянь з дискретними похідними достатньо багато. Також раніше розглядалися деякі питання для рівнянь з дискретними мультіплікативними похідними. В статті розглядається задача Коші та крайова задача для вищезгаданих дискретних рівнянь з поверативними похідними як продовження дискретних похідних. Слід відмітити, що рівняння з дискретно-мультіплікативними похідними нелінійні. Але рівняння з дискретно- адитивними похідними лінійні.

Ключові слова: дискретна адитивна похідна, дискретна мультіплікативна похідна, дискретна поверативна похідна, задача Коші, крайова задача.

It is known that just enough investigated solution of Cauchy and boundary problems for discrete derivative equations. It is known that solution of the Cauchy and boundary value problems for the fractional derivative equations are well investigated. Also some problems were considered for the discrete multiplicative derivative equations. Here we consider the Cauchy and boundary value problems for the above mentioned fractional powerative derivative equations as a continuation of the fractional derivatives. We should note, that these equations are non-linear as a fractional multiplicative derivative. But fractional additive derivative equations are linear.

Key words: discrete additive derivative, discrete multiplicative derivative, discrete powerative derivative, Cauchy problem, boundary problem.

Статтю представив д.ф.-м.н. Хусаїнов Д.Я.

I. INTRODUCTION

It is well-known that the event sometimes is discrete itself. For example, the mathematical model of the rabbit breeding procedure leads to the Fibonacci sequence formulation [1]. In the same way, the general set of the numerical sequence is also a discrete model [2]. These models are provided with discrete additive derivatives. The general theory of these could be found in the following literature [3] - [5].

Multiplicative derivative and an uninterrupted form and the simple properties of integral are given as uninterrupted form 3 on page 4, [6] When we become a discrete multiplication, we can illustrate the problem of establishing the general limit of the series [2].

The issues for discrete-multiplicative-additive and multiplicative-additive derivative equations were considered in [7] - [9].

As for a derivative powerative it is worth noting that it is necessary to make a new deed

in order to illustrate it in the uninterrupted form. Do not to avoid these difficulties to these desires we talk about a discrete powerative derivative. It is enough to sum this with one inverse algebraic root deed [10].

In the case of theoretical investigation of the issues considered in modern mathematics, the issues are discrete for ordinary or special derivative equations and it is possible to state a certain judgment on solution of a discrete problem as the obtaining system of the linear algebraic equations are solved, the chosen step is approximated by zero, [11] - [13].

II. DEFINITION

Let's look at the following equation as:

$$\left(\left(y_n^{(I)} \right)^{[I]} \right)^{\{I\}} = f_n, n \geq 0, \quad (1)$$

Here $\{f_n\}$, $n \geq 0$ given sequence, $\{y_n\}$, $n \geq 0$ is the desired sequence.

By using the definition of the discrete additive, multiplicative and powerative derivatives:

$$\begin{aligned} y_n^{(I)} &= y_{n+1} - y_n, \\ \left(y_n^{(I)} \right)^{[I]} &= (y_{n+1} - y_n)^{[I]} = \frac{y_{n+2} - y_{n+1}}{y_{n+1} - y_n}, \\ \left(\left(y_n^{(I)} \right)^{[I]} \right)^{\{I\}} &= \left(\frac{y_{n+2} - y_{n+1}}{y_{n+1} - y_n} \right)^{\{I\}} = \\ &= \frac{\frac{y_{n+2} - y_{n+1}}{y_{n+1} - y_n}}{\sqrt{\frac{y_{n+3} - y_{n+2}}{y_{n+2} - y_{n+1}}}}, \end{aligned}$$

It then falls below (1):

$$y_{n+3} = y_{n+2} + (y_{n+2} - y_{n+1}) f_n^{\frac{y_{n+2} - y_{n+1}}{y_{n+1} - y_n}}, \quad (2)$$

$$n \geq 0.$$

Here, if accept: $n=0$

$$y_3 = y_2 + (y_2 - y_1) f_0^{\frac{y_2 - y_1}{y_1 - y_0}}, \quad (3)$$

If we take $n = 1$ in the statement (2), then we must:

$$y_4 = y_3 + (y_3 - y_2) f_1^{\frac{y_3 - y_2}{y_2 - y_1}}. \quad (4)$$

By continuing this process all y_n ($n \geq 3$), we can assign through y_0 , y_1 and y_2 .

III. CAUCHY PROBLEM

Thus, as seen from (3) and (4), if

$$y_0 = \alpha_0, y_1 = \alpha_1, y_2 = \alpha_2, \quad (5)$$

if we accept the terms, I mean (1) for equation look at **Cauchy problem**, we obtained:

$$y_3 = \alpha_2 + (\alpha_2 - \alpha_1) f_0^{\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_1 - \alpha_0}}, \quad (6_1)$$

$$y_4 = y_3 + (y_3 - \alpha_2) f_1^{\frac{y_3 - \alpha_2}{\alpha_2 - \alpha_1}}. \quad (6_2)$$

Here in the form of y_3 (6₁). So we have it:

Theorem 1. If the given affirmatively extent sequences f_n $n \geq 0$, α_k $k=0,2$ as the given with constants $\alpha_0 \neq \alpha_1$, and $\alpha_1 \neq \alpha_2$ then, (1), (5) there is unique solution of Cauchy problem, and this solution continuously receives through (2). It is obvious from (6₁) that if, $\alpha_0 \neq \alpha_1$ and $\alpha_1 \neq \alpha_2$, then $y_3 \neq \alpha_2$ or $y_2 \neq y_3$. By the same rule (6₂) it appears that $y_3 \neq y_4$. If we continue this process, $\forall n \in \mathbb{N}$ is $y_n \neq y_{n+1}$. Therefore, the solution (1), (5) can be taken from (2).

Now let's try to get a general solution of the equation (1). To do this, we use the definition of a discrete powerative derivative:

$$\left(y_n^{(I)} \right)^{[I]} \sqrt{\left(y_{n+1}^{(I)} \right)^{[I]}} = f_n, n \geq 0, \quad (7)$$

from here also

$$\left(y_{n+1}^{(I)} \right)^{[I]} = f_n \left(y_n^{(I)} \right)^{[I]}, n \geq 0. \quad (8)$$

In this expression, we have to give values n:

If $n = 0$,

$$\left(y_1^{(I)}\right)^{[I]} = f_0 \left(y_0^{(I)}\right)^{[I]},$$

if we take it (5):

$$\left(y_1^{(I)}\right)^{[I]} = f_0^{\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_1 - \alpha_0}}, \quad (9_1)$$

if $n=1$, we obtain from (8):

$$\left(y_2^{(I)}\right)^{[I]} = f_1 \left(y_1^{(I)}\right)^{[I]} = f_1^{f_0^{\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_1 - \alpha_0}}}, \quad (9_2)$$

if we continue this process:

$$\left(y_n^{(I)}\right)^{[I]} = f_{n-1}^{f_{n-2}^{f_0^{\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_1 - \alpha_0}}}} \equiv g_n. \quad (9_n)$$

Using the definition of the discrete multiplicative derivative to this equation we obtain:

$$\frac{y_{n+1}^{(I)}}{y_n^{(I)}} = g_n, \quad n \geq 0, \quad (10)$$

Here by assigning values to n, obtained

$$\begin{aligned} \frac{y_1^{(I)}}{y_0^{(I)}} &= g_0, \\ \frac{y_2^{(I)}}{y_1^{(I)}} &= g_1, \\ &\vdots \\ \frac{y_n^{(I)}}{y_{n-1}^{(I)}} &= g_{n-1}. \end{aligned}$$

Multiplying the expressions:

$$\begin{aligned} y_n^{(I)} &= y_0^{(I)} \cdot \prod_{k=0}^{n-1} g_k = \\ &= (\alpha_1 - \alpha_0) \cdot \prod_{k=0}^{n-1} g_k \equiv h_n, \quad n \geq 0. \quad (11) \end{aligned}$$

Finally, using the definition of the discrete additive derivative equation (11), we have to assign values n:

$$\begin{aligned} y_1 - y_0 &= h_0, \\ y_2 - y_1 &= h_1, \\ &\dots\dots\dots \\ &\dots\dots\dots \\ y_n - y_{n-1} &= h_{n-1}. \end{aligned}$$

If we add on them side by side,

So we obtain:

$$y_n = y_0 + \sum_{k=0}^{n-1} h_k = \alpha_0 + \sum_{k=0}^{n-1} h_k, \quad n \geq 0. \quad (12)$$

Theorem 2. If the $f_n > 0$, $n \geq 0$ and α_k $k = \overline{0, 2}$ are the numbers given $\alpha_0 \neq \alpha_1$, then there is the unique solution of Cauchy problem (1), (5) and this solution is in the form of (12), so that the h_s are given by (11), and by the g_k (9_n).

IV. THE BOUNDARY PROBLEM

Now let's see the boundary problem for (1) equation:

$$\left(y_0^{(I)}\right)^{[I]} = \frac{y_2 - y_1}{y_1 - y_0} = \alpha, \quad y_0^{(I)} = \beta, \quad y_m = \gamma, \quad (13)$$

if $n=0$, then we obtain from (8):

$$\left(y_1^{(I)}\right)^{[I]} = f_0 \left(y_0^{(I)}\right)^{[I]} = f_0^\alpha. \quad (14)$$

Considering obtained (14) into (9₂) we obtain:

$$\left(y_2^{(I)}\right)^{[I]} = f_1 \left(y_1^{(I)}\right)^{[I]} = f_1^{f_0^\alpha}. \quad (15)$$

By continuing this process, let's take from (8):

$$\left(y_n^{(I)}\right)^{[I]} = f_{n-1}^{f_{n-2}^{f_1^{f_0^\alpha}}} \equiv G_n, \quad (16)$$

Here using the definition of the discrete multiplicative derivative, we obtain:

$$\frac{y_{n+1}^{(I)}}{y_n^{(I)}} = G_n, \quad n \geq 0. \quad (17)$$

Obtained expression (10) we have solved in the solution of Cauchy problem, let's give values to n :

$$\frac{y_1^{(I)}}{y_0^{(I)}} = G_0,$$

$$\frac{y_2^{(I)}}{y_1^{(I)}} = G_1,$$

$\vdots$

$$\frac{y_n^{(I)}}{y_{n-1}^{(I)}} = G_{n-1}.$$

Multiplying these sum expressions side by side:

$$y_n^{(I)} = y_0^{(I)} \prod_{s=0}^{n-1} G_s = \beta \prod_{s=0}^{n-1} G_s \equiv H_n, \quad (18)$$

We obtain this equation.

Finally at (18) using the definition of the discrete additive derivative equation we obtain:

$$y_{n+1} - y_n = H_n, n \geq 0. \quad (19)$$

But here

$$y_n = y_0 + \sum_{k=0}^{n-1} H_k, \quad (20)$$

We acquire this expression. By using (13) the last of the given border conditions, Let's make the arbitrary y_0 constant in (20) :

$$\gamma = y_m = y_0 + \sum_{k=0}^{m-1} H_k,$$

I mean,

$$y_0 = \gamma - \sum_{k=0}^{m-1} H_k. \quad (21)$$

Then from (20) (1), (3) for the solution of boundry problems:

$$y_n = \gamma - \sum_{k=n}^{m-1} H_k. \quad (22)$$

We obtain this expression.

Theorem 3. If $f_n > 0$, $n \geq 0$ is the sequence given, $\alpha > 0$, $\beta \neq 0$ and γ are the constants, then (1), (13) are the solution of the boundary problem (22). Here, H_k (18) is expressed in the form of G_k (16).

V. CONCLUSIONS

Thus, we recieved the solution of the problems Cauchy and boundary for third complied discrete additivo-multiplicativo-powerative derivative equation.

Список використаних джерел

1. Vorobiev N.N. Fibonacci numbers. Popular lectures on mathematics, ed. 6. / N.N. Vorobiev. – Moscow: "Science", 1984. – 144 p.
2. Makarachev Y.H. Algebra. A textbook for VIII class of secondary school, / Y.H. Makarachev, H.G. Mindyuk, V.M. Monakhov, K.S. Mudrovich, S.B. Suvarova. – Baku: "Maarif", 1980. – 250 p.
3. Gelfond A.O. Numerically of finite differences / A.O. Gelfond. – Moscow: "Nauka", 1967. – 376 p.
4. Aliev N. Discrete additive analysis / Aliev N., Bagirov G., İzadi F.A. – Tarbiat Moallem University publishers, Tabriz, İran, 1993. – P.144.

References

1. VOROBIEV, N.N. (1984) *Fibonacci numbers, Popular lectures on mathematics, ed. 6*, Moscow, "Science", 144 p.
2. MAKARACHEV, Y.H., MINDYUK, H.G, MONAKHOV, V.M., MUDROVICH, K.S, SUVAROVA, S.B. (1980) *Algebra, A textbook for VIII class of secondary school*, Baku, "Maarif", 250 p.
3. GELFOND, A.O. (1967) *Numerically of finite differences*, Moscow, "Nauka", 376 p.
4. ALIEV, N., BAGIROV, G., İZADI, F.A. (1993) *Discrete additive analysis*, Tarbiat Moallem University publishers, Tabriz, İran, 144 p.

5. İzadi F.A. Discrete Calculus By Analogy / F.A.İzadi, N.Aliyev, G.Bagirov. – December 3, Iran, 2009. – 154 p.
6. Gantmakher F.R. Theory of Matrices / F.R. Gantmakher – Moscow, "Nauka", 1967. – 576 p.
7. Hassani O.H. Analytic Approach to Solve Specific Linear and Nonlinear Differential Equations / O.H. Hassani, N. Aliev // Jnt. Math. Forum Journal for Theory and Applications. – 2008. – 33-36, Vol. 3. – P. 1623–1631.
8. Aliyev N.A. Boundary problem for the second composite discrete multiplicative derivative equation / N.A.Aliyev, T.S.Mamiyeva // BU's News, Physics-Mathematics Series, Baku. – 2017. – No.1. – P.15–19.
9. Aliyev N.A. Prollekes for the equation of third-order additive multiplicatives / N.A.Aliyev, T.S.Mamiyeva // Materials from the republican scientific conference "Funcional analysis and its applications", Baku. – 2016. – P.17–18.
10. Mammadzada A. Discrete properties of new derivatives / A. Mammadzada // Materials of the Republican Scientific Conference of Young Researchers on "Modernizing Azerbaijan: New Rise Stage", Lankaran. – 2017. – P. 29–30.
11. Hall J. Perfect numerical methods for solving ordinary differential equations/ J. Hall, J.Watt. – «Mir» Moscow, 1979. – 312 p.
12. Mammadov Y.J. Approximate calculation methods / Y.J. Mammadov. – Baku: "Maarif", 1986. – 264 p.
13. Vazov V. Difference methods for the solution of partial differential equations / V. Vazov, J. Forsyte. – IL, Moscow, 1963. – 488 p.
14. Aliyev N. Solution of problems for the second composite discrete poverative derivative equation / N. Aliyev, A. Mammadzada // Scientific News, Natural Sciences. – 2018. – №1. – P. 55–58.
5. İZADI, F.A., ALIYEV, N., BAGIROV, G. (2009) *Discrete Calculus By Analogy*, December 3, Iran, 154 p.
6. GANTMAKHER, F.R. (1967) *Theory of Matrices*, Moscow, "Nauka", 576 p.
7. HASSANI, O.H., ALIEV, N. (2008) "Analytic Approach to Solve Specific Linear and Nonlinear Differential Equations", *Jnt. Math. Forum Journal for Theory and Applications*, 33-36, Vol. 3.,p. 1623–1631.
8. ALIYEV, N.A., MAMIYEVA, T.S. (2017) "Boundary problem for the second composite discrete multiplicative derivative equation", *BU's News, Physics-Mathematics Series*, No.1, p.15-19.
9. ALIYEV, N.A., MAMIYEVA, T.S. (2016) "Prollekes for the equation of third-order additive multiplicatives", *Materials from the republican scientific conference "Funcional analysis and its applications"*, Baku, p. 17-18.
10. MAMMADZADA, A. (2017) "Discrete properties of new derivatives", *Materials of the Republican Scientific Conference of Young Researchers on "Modernizing Azerbaijan: New Rise Stage"*, Lankaran, p. 29-30.
11. HALL, J., WATT, J. (1979) *Perfect numerical methods for solving ordinary differential equations*, Moscow, «Mir», 312 p.
12. MAMMADOV, Y.J. (1986) *Approximate calculation methods*, Baku, "Maarif", p.264 .
13. VAZOV, V., FORSYTE, J. (1963) *Difference methods for the solution of partial differential equations*, IL, Moscow, 1963, 488 p.
14. ALIYEV, N., MAMMADZADA, A. (2018) "Solution of problems for the second composite discrete poverative derivative equation", *Scientific News, Natural Sciences*. Lankaran, №1, p.55-58.

Надійшла до редколегії 19.08.2018

УДК 519.95

Гусейнзаде Ш.С., к.т.н., доц.

Модель автоматизації адаптивного керування на мережах Петрі

Сумгайтський державний університет
AZ5021, Азербайджанська Республіка,
м. Сумгаїт, пос. Джорат, I кв., д. 31

e-mail: shahla.huseynzade@gmail.com

Huseynzade Sh.S., Ph.D. (Tech.), Assoc. Prof.

Automation Model of the Adaptive Control on Petri nets

Sumgayit State University
AZ5021, Azerbaijan Republic, city Sumgayit, Jorat
settlement, 1 quarter, 31

e-mail: shahla.huseynzade@gmail.com

Пропонується модель автоматизації адаптивного нечіткого керування водними насосами на основі мереж Петрі (МП). На базі критеріїв роботи водних насосів відповідно рівням води у насосних колодязях сформовані множини позицій та переходів МП. При описі необхідної поведінки системи відношеннями між позиціями і переходами МП із застосуванням логіки «Якщо... То...» розроблено алгоритм адаптації. На основі алгоритму визначені матриці вхідних та вихідних інцидентностей. Розроблено граф-модель МП. Візуалізація моделі реалізована у системі CPN Tools. Проведено комп'ютерні експерименти симуляції і аналізу мережі.

Ключові слова: мережі Петрі, алгоритм адаптації, керування водними насосами, матриця інцидентностей, симуляція мережі.

A model is proposed for automation of adaptive fuzzy control of water pumps based on Petri nets (PN). Based on the criteria for the operation of water pumps in accordance with the water levels in the pump well, many of the positions and transitions of the PN are formed. An adaptation algorithm is developed describing the necessary behavior of the system by the relationship between positions and transitions of the PN using the logic "If ... Then ...". Based on the algorithm, input and output incidence matrices are defined. A graph-model of the PN was developed. Visualization of the model is realized in the CPN Tools system. Computer simulations and network analysis were conducted.

Key Words: Petri nets, adaptation algorithm, water pumps control, incidence matrix, network simulation.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Хусаїнов Д.Я.

I. INTRODUCTION

The water pump installations are placed on the way of drains and in places of wastewater treatment, work on their automation is carried out. However, changes in the rainwater runoff process make full automation difficult. When the amount of rainwater runoff increases, sudden water flows appear.

To prevent such phenomena, on the one hand, it is planned to control the rainwater runoff due to water-permeable bridges and soil accumulating rainwater, and on the other hand- to expand the sewage pipes, increase the number and throughput of pumps. However, increasing the productivity of the equipment generates new problems: due to the imbalance between the inflowing stream and the throughput, the frequency of turning the pumps on and off increases and there appears a need to control the opening of the shutter in the case of water flows

exceeding the pump capacity. A control system of decision-making and control is required which would not depend on the individual qualities of the maintenance staff and would ensure load reduction.

The considered system as well as the majority of systems of a manufacturing industry is strongly nonlinear, and, therefore, parameters of system can experience come uncertainties. Thus, the management of such nonlinear installations is of practical importance. Automation of pumping installations is an important problem due to its extensive applications. In solving such problems, fuzzy logic provides a powerful platform that allows engineers to apply human reasoning to the control algorithm [1].

Previously, many methods of intellectual control were proposed to cope with the problem of controlling non-linear processes, such as neural

networks, genetic algorithms and fuzzy logic. Many researchers have proposed various fuzzy logic controllers to solve problems [2]. In our research we seek to present yet another alternative method as Petri nets.

II. THE MAIN ASPECTS OF APPLYING THE PN TO THE MODELING OF ADAPTIVE FUZZY CONTROL OF WATER PUMPS

The construction of the models of the systems in the form of PN is based on a variety of events and conditions, as well as on some obvious cause-effect relationships. In Petri nets, sequences of events are displayed by transitions [3]. The fulfillment of any condition is associated with the appearance of a label in the position corresponding to this condition. To improve the quality of development, verification is used that the model satisfies the requirements formulated in advance [4]. The PN is the integration of a graph and a discrete dynamic system, it can serve both as a static and dynamic model of the object represented with it. Of no small importance is the known advantage of these networks, the convenience of their programming on the computer.

Definition 1. The Petri net is formally represented as a set of the form $N = (P, T, F, H, \mu^0)$, where $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$, $n > 0$ is a finite non-empty set of positions (otherwise states or places); $T = \{t_1, t_2, \dots, t_m\}$, $m > 0$ is a finite non-empty set of transitions (events); $F: P \times T \rightarrow \{0, 1, 2, \dots\}$ and $H: P \times T \rightarrow \{0, 1, 2, \dots\}$ are respectively, the functions of input and output incidents, and the view $\mu^0: P \rightarrow \{0, 1, 2, \dots\}$ initial marking (marking each position) [5].

The graphical representation of the Petri nets is a bipartite oriented graph with two types of vertices. Vertices $p \in P$ are represented by circles, and vertices $t \in T$ – rectangles. The arcs correspond to the functions of incidence of positions and transitions.

Below we consider the features of the water pump operation and the adaptive fuzzy control method, which can be used for efficient automation. The control rules are designed based on the performance criteria of water pumps in the pump well, which are used by a qualified worker [6]:

1. If the current water level in the pump well is high and it is expected to increase, another pump is turned on.
2. If the water level in the pump well is low and its lower position is presumed, one of the pumps is turned off.

3. If a sudden increase in rainwater runoff is expected, the pump is turned on urgently and a low water level in the pump well is supported.

4. If, with increasing water flow, a conclusion is drawn that there is no danger, the operation of the pumps is maintained in the same regime even when the water level rises.

5. In the case of a large influx of rainwater, the water level in the pump well is maintained at a lower elevation for safety reasons.

Evaluation of the water level in the pump well and the trend of its change are different depending on the situation with the inflow of water. To construct a model for effective automation of adaptive fuzzy control of water pumps based on PN, at first structural elements of the PN are described: All states associated with the water levels in the pump well, taking into account the situation with the influx of rainwater, are accepted as PN positions. Actions related to incoming information in the system about the situation with water inflow are accepted as PN transitions. The links between states and actions are accepted as arcs of PN.

To describe non complete knowledge of the behavior of the system, the linguistic variable "water level" and the terms of the linguistic variable are used. The terms of a variable correspond to its fuzzy values and are denoted by an expression characterizing one of the states of the parameter of the system. The values "slightly increased", "increased", "highly increased", "slightly reduced", "reduced", "highly reduced", "normal" correspond to the terms of the variable "water level", which will describe the behavior of the system and the desired response of the technical object. The term determines the degree of belonging of the data received from the sensor to the specified area of fuzzy values.

III. FORMATION OF STRUCTURAL ELEMENTS AND INCIDENCE MATRICES PN

Assume that there are 3 pumps in the pump well. On the basis of the criteria for the operation of water pumps in accordance with the water levels in the pump well, which are used by a qualified worker, many of the positions and transitions of the PN are described:

- Positions:

p1 — The registration sensor has input information; p2 — the water level in the pumping well is slightly increased; p3 — the water level in the pump well is increased; p4 — the water level in the pumping well is highly increased; p5 — the water

level in the pumping well is slightly reduced; p6 — the water level in the pumping well is reduced; p7 — the water level in the pumping well is highly reduced; p8 — the water level in the pump well is normal (as usual); p9 — the 1st pump is turned off; p10 — the 2nd pump is turned off; p11 — the 3rd pump is turned off; p12 — the 1st pump is turned on; p13 — the 2nd pump is turned on; p14 — the 3rd pump is turned on.

• Transitions:

t1 — input of data from the registration sensor into the system; t2 — turn on the 1st pump; t3 — turn on the 2nd pump; t4 — turn on the 3rd pump; t5 — turn off the 1st pump; t6 — turn off the 2nd pump; t7 — turn off the 3rd pump.

Fuzzy logic allows engineers to transfer their empirical knowledge as "If-Then" rules for the functional block. These capabilities allow the use of fuzzy logic in technical applications, such as intelligent control systems, decision making and expert systems [7].

Using the logic "If ... Then ..." the necessary behavior of the system is verbally described [8]. In accordance the algorithm of adaptation is created.

if p1 and p8 to t1;
if t1(si) to p2;
if t1(i) to p3;
if t1(hi) to p4;
if t1(sr) to p5;
if t1(r) to p6;
if t1(hr) to p7;
if p2 and p9 to t2;
if p3 and p10 to t3;
if p4 and p11 to t4;
if p5 and p12 to t5;
if p6 and p13 to t6;
if p7 and p14 to t7;
if t2 to p8 and p12;
if t3 to p8 and p13;
if t4 to p8 and p14;
if p5 and p12 to t5;
if p6 and p13 to t6;
if p7 and p14 to t7;
if t5 to p8 and p9;
if t6 to p8 and p10;
if t7 to p8 and p11.

The relationship between positions and transitions is determined by the matrices of input and output incidents. The matrix of input incidents from positions to transitions D^+ and the incidence matrix from the transitions to the positions D^- are formed as follows:

$$D^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D^- = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$D^+[i,j]=\#(p_i,I(t_j))$, a $D^-[j,i]=\#(p_i,O(t_j))$, where $i = \overline{1,8}$, $j = \overline{1,7}$ (8-number of positions, 7-number of transitions). I and O — the functions of input and output incidents. $\#(p_i,I(t_j))$ — the element is equal to the number of arcs from the i -th position to the j -th transition. $\#(p_i,O(t_j))$ — the element is equal to the number of arcs from the j -th transition to the i -th position. The incidence matrix is formed as follows:

$$D = D^+ - (D^-)^T$$

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

This matrix expresses the input and output relations between positions and transitions. Representing the positions by circles, transitions by rectangles and the relations between them by connecting arcs, a model is built on CPN Tools (Figure 1) [9].

The "si", "i", "hi", "sr", "r", "hr" chips mean the information entering the system, respectively, slightly increasing, increasing, highly increasing and slightly reducing, reducing, a highly reducing of the

water level in the pump well. The attributes of the output from t1 arcs contain the conditions, under which the corresponding chip is selected, otherwise the special chip Empty is selected [10].

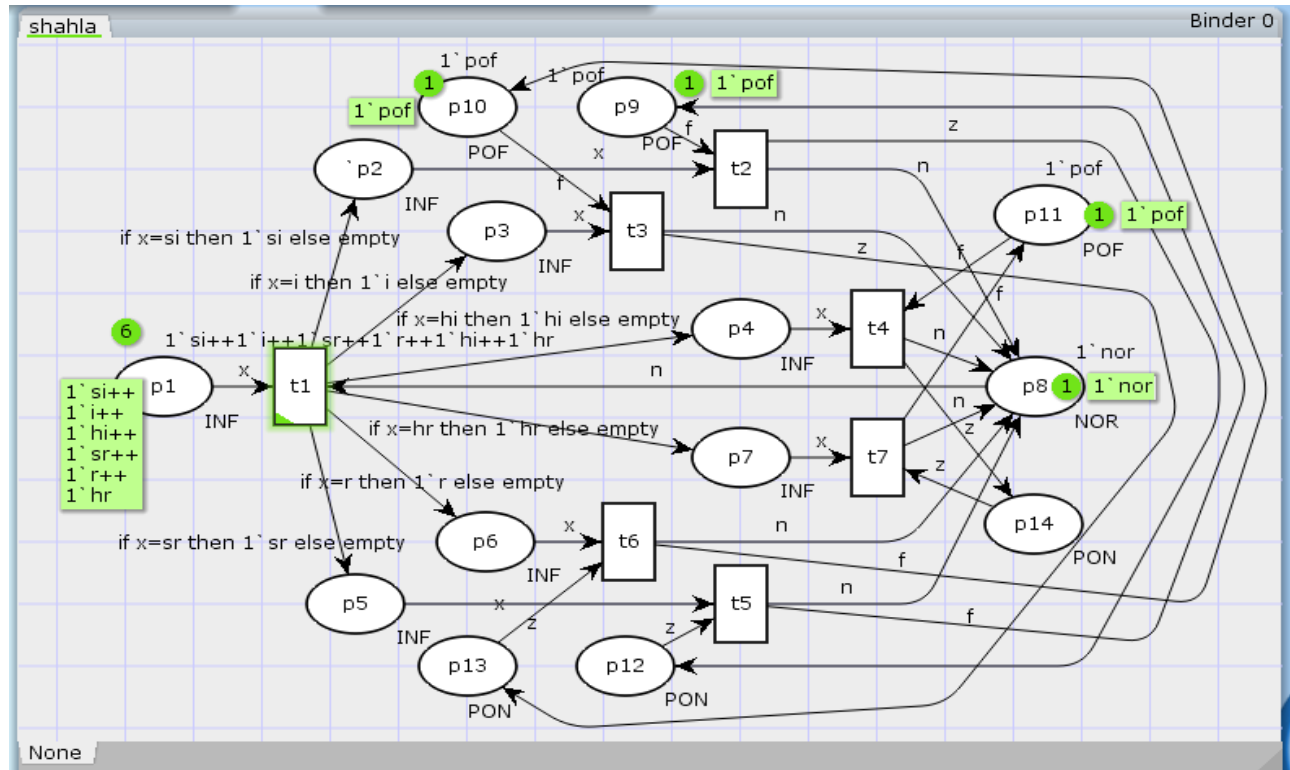


Figure 1. Graph model on CPN Tools.

In the presented PN, the following descriptions of the set of colors and variables are used:

Declarations

Standart priorities

Standart Declarations

colset UNIT=unit;

colset BOOL

colset INT

colset INTINF

colset TIME

colset NOR=unit with normal;

colset POF=unit with pof;

colset PON=unit with pon;

colset REAL

colset INF=with si|i|hi|sr|r|hr;

colset STRING

var n:NOR;

var x:INF;

var z:PON;

var f:POF;

Based on the above mentioned initial data, machine simulations of the network were carried out. Simulation of the model begins with the location of the markers. On the basis of incoming information, decisions are automatically made, the pumps are turned on and off and the situation is normalized.

The behavior of the simulated system as a result of the simulation is analyzed by the properties of the PN. The developed Petri net is limited. The tasks of attainability and liveness for this colored CPN are also solved, since all transitions are performed and the network is brought to the initial state. The network is periodic and all markings are achievable. As a result of the simulation, the rapid adaptation of the system to the situation is demonstrated. The absence of dead ends shows the liveness of the system.

IV. CONCLUSIONS

The paper presents the principal aspects of the developed approach. Using the method of fuzzy control simplifies the recording of all perturbations and the creation of the necessary set of commands

for controlling water pumps, to maintain the required water level.

It is possible on the model to develop management principles which correspond to situations, identify shortcomings, deadlock states and make adjustments. This will allow set up the system at an optimal operating mode without extra costs.

The results obtained are mainly of a theoretical nature. Potential areas of applying the developed approach can be found in the dispatch control systems of the discrete events.

Список використаних джерел

1. White Frank M. Fluid Mechanics / Frank M. White. - McGraw Hill, 2011. – 885 p.
2. Disha M., Pandey P. K., Chug R. Simulation of Water Level control in a Tank using Fuzzy logic/ M. Disha, P.K. Pandey, R. Chug. // IOSR Journal of Electrical and Electronics Engineering. – 2012. – Vol. 2, no 3. – P. 09–12.
3. Nielsen M., Rozenberg G., Thiagarajan P.S. Behavioural notions for elementary net systems/ M. Nielsen, G. Rozenberg, P.S. Thiagarajan // Distributed Computing. – 1990. – Vol.4, no.1. – P. 45–57.
4. Карпов Ю.Г. Model Cheking. Верификация параллельных и распределенных программных систем/ Ю.Г. Карпов. – СПб.: БХВ–Петербург, 2010. – 560 с.
5. Питерсон Дж. Теория сетей Петри и моделирование систем / Дж. Питерсон. – М.: Мир, 1984. – 264 с.
6. Терано Т., Асаи К., Сугено М. Прикладные нечеткие системы / Т. Терано, К. Асаи, М. Сугено – М.: Мир, 1993. – 368 с.
7. Molhotra, Singh N., Singh Y. Fuzzy Logic Modeling, Simulation and Control: A Review” / Molhotra, N. Singh, Y. Singh // International Journal of Computer Science and Technology. – 2010. – vol.1, Issue 2. – P. 183–188.
8. Колесников А.А., Веселов Г.Е., Попов А.Н. и др. Современная прикладная теория управления: Новые классы регуляторов технических систем/ Под ред. А.А. Колесникова. – Таганрог: Изд-во ТРТУ, Ч.III., 2000. – 640 с.
9. Zaitsev D.A. Switched LAN Simulation by Colored Petri Nets / D.A. Zaitsev // Mathematics and Computers in Simulation. – 2004. – Vol. 65. – P. 245–249.
10. Van der Aalst W.M.P., Stahl C. Modeling Business Processes: A Petri Net - Oriented Approach, / W.M.P. van der Aalst, C. Stahl, – The MIT Press, 2011 (ISBN-13: 978-0-262-01538-7). – 400 p.

References

1. WHITE, FRANK M. (2011), *Fluid Mechanics*, McGraw Hill.
2. DISHA, M., PANDEY, P. K. and CHUG, R. (2012), “Simulation of Water Level control in a Tank using Fuzzy logic”, *IOSR Journal of Electrical and Electronics Engineering*, vol. 2, no. 3, pp. 09–12.
3. NIELSEN, M., ROZENBERG, G., THIAGARAJAN, P.S. (1990), “Behavioural notions for elementary net systems”, *Distributed Computing*, vol.4, no.1, pp. 45–57.
4. KARPOV, YU. G. (2010), *Model Cheking. Verification of parallel and distributed software systems*. SPb.: BHV–Peterburg. [in Russian language].
5. PETERSON, DZH. (1984), *Theory of Petri nets and modeling of the systems*, Moscow: Mir. [in Russian language]
6. TERANO, T., ASAI, K., SUGENO, M. (1993), *Prikladnye nechetkie sistemy*, M.: Mir. [in Russian language]
7. MOLHOTRA, SINGH, N., SINGH, Y. (2010), “Fuzzy Logic Modeling, Simulation and Control: A Review”, *International Journal of Computer Science and Technology*, vol. 1, Issue 2, pp. 183–188.
8. KOLESNIKOV, A.A., VESELOV, G.E., POPOV, A.N. and etc. (2000), *Modern Applied Control Theory: New Classes of Regulators of Technical Systems* / Ed. A.A. Kolesnikov. Taganrog: TRTU, part 3. [in Russian language]
9. ZAITSEV, D.A. (2004), “Switched LAN Simulation by Colored Petri Nets”, *Mathematics and Computers in Simulation*, vol. 65, pp. 245–249.
10. VAN DER AALST, W.M.P., STAHL, C. (2010), *Modeling Business Processes: A Petri Net-Oriented Approach*, The MIT Press, (ISBN-13: 978-0-262-01538-7).

Надійшла до редколегії 19.08.2018

УДК 519.21:519.6

Пашко А.О.¹, д.ф.-м.н,
Розора І.В.², к.ф.-м.н., доц.

Аналіз точності моделювання дробового броунівського руху в рівномірній метриці

^{1,2}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т.
Академіка Глушкова 4д,
e-mail: 1aap2011@ukr.net,
2irozora@bigmir.net

Pashko A.O.¹, Dr. Sci.,
Rozora I.V.², PhD, Associate Prof.

Analysis of Accuracy for Simulation of the Fractional Brownian Motion in uniform metrics

^{1,2}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova av., 4d,
e-mail: 1aap2011@ukr.net
2irozora@bigmir.net

В роботі досліджуються оцінки точності моделювання дробового броунівського руху в нормі простору неперервних функцій. В якості моделі розглядається спектральне представлення дробового броунівського руху у вигляді випадкових рядів. Отримані оцінки дозволяють будувати моделі із заданими точністю і надійністю для різних прикладних задач. Розглянуто точність моделювання безпосередньо дробового броунівського руху та у випадку, коли дробовий броунівський рух є вхідним сигналом для однорідної лінійної системи з відомою імпульсною функцією. Проведено оцінку основних параметрів моделі та наведено результати моделювання.

Ключові слова: дробовий броунівський рух, індекс Хюрста, точність та надійність моделі, Гауссовий випадковий процес.

Nowadays the theory of stochastic processes is widely used in different branches of science and not only in natural science. That's why one of the relevant problems is to build a mathematical model of stochastic process and study its properties. The problems of numerical simulations become especially important due to the powerful possibilities of computer technologies that allow to create software modeling tools and predict the behavior of a random process. There are various simulation methods of stochastic processes and fields. But in most papers dealing with the simulation of stochastic processes the question of accuracy and reliability has not been studied. In this article this problem is investigated, it means that at first we construct the model and then verify it using some adequacy tests.

In this paper, the estimates of the accuracy for the simulation of the fractional Brownian motion in the uniform metrics are studied. As a model, the spectral representation of the fractional Brownian motion in the form of random series is considered. The obtained estimates allow to construct models with given accuracy and reliability for various applications. The fractional Brownian motion is considered as an input signal for a homogeneous linear system with a known impulse function. The constructed model approximates the input process with given accuracy and reliability in space $C(T)$ taking into account output signal of the system.

Keywords— Fractional Brownian motion, Hurst index; accuracy and reliability of the model; Gaussian random process

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

Вступ

В останні роки методи статистичного моделювання випадкових процесів та полів знаходять широке застосування в різних прикладних галузях. Найбільш використовуються моделі гауссових, субгауссових, квадратично-гауссових випадкових процесів. Особливе місце серед них займають вінерівський та узагальнений вінерівський випадковий процеси (дробовий броунівський рух).

Перелік галузей використання методів статистичного моделювання вінерівського та узагальненого вінерівського процесів розширюється з кожним днем. Так, моделі вінерівського та узагальненого вінерівського випадкових процесів використовуються в фінансовій математиці [1], при розв'язуванні задач обчислювальної математики [2], при оцінюванні Хаусдорфової розмірності [3], в задачах оцінки якості роботи систем масового обслуговування [4], в задачах моделювання трафіку в теорії телекомунікаційних мережах [5-7].

В [8-10] досліджувались методи статистичного моделювання гауссових та близьких до них випадкових процесів із заданими точністю і надійністю в різних функціональних просторах, а саме, просторах $L_p(T)$, просторах Орліча та в просторі неперервних функцій.

Мета роботи – дослідження точності статистичного моделювання дробового броунівського руху для прикладних задач, наприклад, коли дробовий броунівський рух подається на вхід лінійної системи.

Основна частина

Нехай (T, B, μ) - деякий вимірний простір і $\mu(T) = 1$.

Означення 1. Дробовим броунівським рухом з індексом Хюрста $\alpha \in (0, 1)$ називається гауссівський процес $W_\alpha(t)$, $t \in [0, 1]$ такий, що $W_\alpha(0) = 0$, $EW_\alpha(t) = 0$ та коваріаційною функцією $R_\alpha(t, s) = \frac{1}{2}(|t|^{2\alpha} + |s|^{2\alpha} - |t-s|^{2\alpha})$.

При $\alpha = \frac{1}{2}$ маємо стандартний вінерівський процес.

Дробовий броунівський рух можна зобразити у вигляді випадкового ряду [11]

$$W_\alpha(t) = \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \sin(x_k t) X_k + b_k (1 - \cos(y_k t)) Y_k), \quad (1)$$

де $\{X_k, Y_k\}$ - незалежні стандартні гауссові випадкові величини,

$\{x_k\}$ - нулі функції Бесселя $J_{-\alpha}(x)$,

$\{y_k\}$ - нулі функції Бесселя $J_{1-\alpha}(x)$,

$$a_k = \frac{\pi^\alpha \sqrt{2C}}{x_k^{\alpha+1} J_{1-\alpha}(x_k)}, \quad b_k = \frac{\pi^\alpha \sqrt{2C}}{y_k^{\alpha+1} J_{-\alpha}(y_k)},$$

$$C = \frac{\Gamma(2\alpha+1) \sin(\pi\alpha)}{\pi^{2\alpha+1}}.$$

Для обчислення нулів функцій Бесселя будемо використовувати зображення

$$x_n = \left(n + \frac{3}{4} - \frac{\alpha}{2}\right)\pi - \frac{4\alpha^2 - 1}{2\pi(4n+3-2\alpha)} + \dots$$

$$y_n = \left(n + \frac{5}{4} - \frac{\alpha}{2}\right)\pi - \frac{4(1-\alpha)^2 - 1}{2\pi(4n+1+2\alpha)} + \dots$$

Для обчислення функцій Бесселя будемо використовувати зображення

$$J_{1-\alpha}^2(x_n) = \sqrt{\frac{2}{\pi x_n}} \left(\cos\left(x_n + \frac{2\alpha\pi - \pi}{4}\right) - \frac{4\alpha^2 - 1}{8x_n} \sin\left(x_n + \frac{2\alpha\pi - \pi}{4}\right) \right),$$

$$J_{-\alpha}^2(y_n) = \sqrt{\frac{2}{\pi y_n}} \left(\cos\left(y_n + \frac{2(1-\alpha)\pi - \pi}{4}\right) - \frac{4(1-\alpha)^2 - 1}{8y_n} \sin\left(y_n + \frac{2(1-\alpha)\pi - \pi}{4}\right) \right).$$

Модель випадкового процесу будемо у вигляді

$$S_\alpha(t, M) = \sum_{k=1}^M (a_k \sin(x_k t) X_k + b_k (1 - \cos(y_k t)) Y_k),$$

де $\{X_k, Y_k\}$ - незалежні стандартні гауссові випадкові величини.

При реальному моделюванні незалежних гауссових випадкових величин, за рахунок точності представлення та обчислення дійсних чисел, отримуємо строго субгауссові випадкові величини. Нулі функцій Бесселя та значення також обчислюються з деякою точністю.

Для a_k, b_k, x_k, y_k позначимо їх наближені значення $\tilde{a}_k, \tilde{b}_k, \tilde{x}_k, \tilde{y}_k$.

$$\text{Нехай } |a_k - \tilde{a}_k| \leq h_k^a, \quad |b_k - \tilde{b}_k| \leq h_k^b,$$

$$|x_k - \tilde{x}_k| \leq h_k^x, \quad |y_k - \tilde{y}_k| \leq h_k^y,$$

де $h_k^a, h_k^b, h_k^x, h_k^y$ - задана точність.

Тоді модель дробового броунівського руху матиме вигляд

$$\tilde{S}_\alpha(t, M) = \sum_{k=1}^M (\tilde{a}_k \sin(\tilde{x}_k t) X_k + \tilde{b}_k (1 - \cos(\tilde{y}_k t)) Y_k) \quad (2)$$

А точність моделювання $\Delta(t)$ рівна $\Delta(t) = W_\alpha(t) - \tilde{S}_\alpha(t, M)$.

В роботі [12] досліджувались оцінки точності і надійності моделі (2) дробового броунівського руху в різних функціональних просторах.

При використанні цієї моделі необхідно обчислювати нулі функції Бесселя з великою точністю. Це вимагає великої підготовчої роботи.

Нехай випадковий процес $X(t)$ і всі $X_n(t, \Lambda)$ належать деякому банаховому простору $A(T)$ з нормою $\|\cdot\|$. Нехай задано два числа $\delta > 0$ та $0 < \varepsilon < 1$.

Будемо говорити, що модель $X_n(t, \Lambda)$ наближає процес $X(t)$ з надійністю $1 - \varepsilon$ і точністю δ в нормі простору $A(T)$, якщо має місце $P\{\|X(t) - X_n(t, \Lambda)\| > \delta\} \leq \varepsilon$.

На основі результатів роботи [12] для $\alpha > \frac{1}{2}$ можна сформулювати наступну теорему.

Теорема 1. Модель $\tilde{S}_\alpha(t, M)$ наближає процес $W_\alpha(t)$ з точністю $\delta > 0$ і надійністю $1 - \varepsilon$, $0 < \varepsilon < 1$ в нормі простору $C([0, 1])$, якщо для $0 < p < 1$, $\beta < 1$, мають місце нерівності

$\delta > \max(D_1(M), D_2(M))$, та

$$2 \left\{ \exp \left\{ - \frac{\left(\frac{\delta}{2} - D_1(M) \right)^2}{2B_1(M)} \right\} + \exp \left\{ - \frac{\left(\frac{\delta}{2} - D_2(M) \right)^2}{2B_2(M)} \right\} \right\} \leq \varepsilon,$$

$$\text{де } D_1(M) = \frac{(2\alpha - 1)v^{1 - \frac{1}{2\alpha}}}{2\alpha(1 - p)p^{\frac{1}{2\alpha}}},$$

$$D_2(M) = (p\beta)^{-\frac{1}{2\alpha}} \left(\gamma_0 + \frac{(2\alpha - 1)p\beta}{2\alpha(1 - p)p^{\frac{1}{2\alpha}}} \right),$$

$$B_1(M) = \frac{G^2}{1 - p} + \frac{v^2}{p(1 - p)^2}, B_2(M) = \frac{\gamma_0^2}{1 - p} + \frac{p\beta^2}{(1 - p)^2},$$

$$G^2 = \sum_{i=1}^M \left((h_i^c)^2 + 4(h_i^d)^2 \right), \gamma_0^2 = \sum_{i=M+1}^{\infty} (c_i^2 + 4d_i^2),$$

$$\sigma(u) = u^{\frac{1}{\alpha}}.$$

Розглянемо однорідну лінійну систему з дійснозначною двічі інтегрованою імпульсною перехідною функцією $H(\tau)$, яка визначена на

відрізку $\tau \in [0, T]$. Це означає, що реакція системи на вхідний сигнал $X(t)$, який спостерігається на $[-T, T]$, має вигляд

$$Y(t) = \int_0^T H(\tau) X(t - \tau) d\tau, \quad t \in [0, T] \quad (3)$$

та $H \in L_2([0, T])$.

Припустимо, що імпульсна функція відома. Ми також припускаємо, що вхідний сигнал $X_\alpha(t)$ системи (3) є дробовим броунівським рухом (1) з індексом Х'юрста α . З (1) та (3) випливає, що відгук системи $Y(t)$ можна представити як

$$Y(t) = Y_\alpha(t) = \sum_{k=0}^{\infty} (\xi_k \cdot c_k(t) + \eta_k \cdot s_k(t)), \quad (4)$$

Де функції $c_k(t)$, $s_k(t)$ дорівнюють

$$c_k(t) = b_k \int_0^T H(\tau) (1 - \cos(y_k(t - \tau))) d\tau, \quad (5)$$

$$s_k(t) = a_k \int_0^T H(\tau) \sin(x_k(t - \tau)) d\tau.$$

Так, наприклад, для $H(\tau) = 1$ функції $c_k(t)$, $s_k(t)$ дорівнюють

$$s_k(t) = \frac{2a_k}{x_k} \sin\left(x_k t - \frac{x_k T}{2}\right) \sin\left(\frac{x_k T}{2}\right)$$

$$c_k(t) = b_k T - \frac{2b_k}{y_k} \cos\left(y_k t - \frac{y_k T}{2}\right) \sin\left(\frac{y_k T}{2}\right).$$

Для $H(\tau) = \exp(-\lambda\tau)$ функції $c_k(t)$, $s_k(t)$ дорівнюють

$$s_k(t) = \frac{a_k}{\sqrt{\lambda^2 + x_k^2}} \sin\left(x_k t - \arcsin\left(\frac{x_k}{\sqrt{\lambda^2 + x_k^2}}\right)\right) -$$

$$\frac{a_k \exp(-\lambda T)}{\sqrt{\lambda^2 + x_k^2}} \sin\left(x_k t - x_k T - \arcsin\left(\frac{x_k}{\sqrt{\lambda^2 + x_k^2}}\right)\right)$$

$$c_k(t) = \frac{1 - \exp(-\lambda T)}{\lambda} -$$

$$\frac{b_k}{\sqrt{\lambda^2 + y_k^2}} \cos\left(y_k t - \arcsin\left(\frac{y_k}{\sqrt{\lambda^2 + y_k^2}}\right)\right) +$$

$$\frac{b_k \exp(-\lambda T)}{\sqrt{\lambda^2 + y_k^2}} \cos\left(y_k t - y_k T - \arcsin\left(\frac{y_k}{\sqrt{\lambda^2 + y_k^2}}\right)\right).$$

Розглянемо умови та метод побудови моделі процесу $X_\alpha(t)$, при яких модель апроксимує вхідний сигнал $X_\alpha(t)$, враховуючи відгук системи

(вихідний процес) $Y(t)$ із наперед заданою точністю та надійністю в банаховому просторі $C([0, T])$. Для цього використовується теорія квадратично-гауссових випадкових величин та процесів.

В якості моделі для стохастичного процесу $X_\alpha(t)$ будемо розглядати модель (2).

Означення 2. Випадковий процес $X_{\alpha, N}(t)$ називається моделлю процесу $X_\alpha(t)$, якщо

$$X_{\alpha, N}(t) = \sum_{k=0}^N (b_k \xi_k (1 - \cos y_k t) + a_k \eta_k \sin x_k t).$$

Якщо модель $X_N(t)$ виступає як вхідний сигнал лінійної системи, то вихідний процес подається наступним чином

$$Y_N(t) = \sum_{k=0}^N (\xi_k \cdot c_k(t) + \eta_k \cdot s_k(t)),$$

де функції $c_k(t), s_k(t)$ з (5).

Через $\xi_N(t)$ позначимо суму квадратів різниць $X(t) - X_N(t)$ та $Y(t) - Y_N(t)$

$$\xi_N(t) = (X(t) - X_N(t))^2 + (Y(t) - Y_N(t))^2. \quad (6)$$

Означення 3. Будемо говорити, що модель $X_N(t)$ наближає випадковий процес $X(t)$, враховуючи відгук системи (3) із заданою надійністю $1 - \nu$, $\nu \in (0, 1)$, та точністю $\delta > 0$ в просторі $C([0, T])$, якщо

$$P \left\{ \sup_{t \in [0, T]} |\xi_N(t) - E \xi_N(t)| > \delta \right\} < \nu.$$

Значення $\xi_N(t)$ характеризує точність моделювання вхідного гауссового процесу з урахуванням виходу системи. Даний процес є сумою квадратів гауссових випадкових процесів. Має місце наступна теорема про розподіл супремума такого процесу [9].

Теорема 2.[9] Припустимо, що $\xi(t), t \in [0, T]$, є сумою квадратів гауссових процесів та

$$\sup_{|t-s|<h} \sqrt{D(\xi(t) - \xi(s))} \leq \sigma(h) = kh^\beta, \quad \beta \in (0, 1],$$

де k є деяка стала. Тоді для x такого, що

$$x > \frac{2\sqrt{2} \max\{\delta_0, k(T/2)^\beta\}}{\beta},$$

Виконується наступна нерівність

$$P \left\{ \sup_{t \in [0, T]} |\xi(t)| > x \right\} < 4e^{\frac{3}{\beta}} \exp \left\{ -\frac{x}{2\sqrt{2}\delta_0} \right\} \times \left(\frac{x\beta}{2\sqrt{2}\delta_0} \right)^{2/\beta} \left(1 + \frac{2x}{\sqrt{2}\delta_0} \right)^{1/2}$$

$$\text{Де } \delta_0 = \sup_{t \in [0, T]} (D(X(t)))^{1/2}.$$

Для процесу $\xi_N(t)$ можна використати Теорему 2.

Позначимо

$$\begin{aligned} \phi_{kl}^1(t) &= b_k a_l (1 - \cos(y_k t))(1 - \cos(y_l t)) + c_k(t) c_l(t); \\ \phi_{kl}^2(t) &= 2(b_k a_l (1 - \cos(y_k t)) \sin(x_l t) + c_k(t) s_l(t)); \quad (7) \\ \phi_{kl}^3(t) &= a_k a_l \sin(x_k t) \sin(x_l t) + s_k(t) s_l(t). \end{aligned}$$

Тоді з (1), (4) та (6) випливає, що процес $\xi_N(t)$ можна подати у вигляді ряду

$$\xi_N(t) = \sum_{k, l=N+1}^{\infty} (\phi_{kl}^1(t) \xi_k \xi_l + \phi_{kl}^2(t) \xi_k \eta_l + \phi_{kl}^3(t) \eta_k \eta_l) \quad (8)$$

Позначимо також різниці

$$\begin{aligned} \Delta \phi_{kl}^1 &= \phi_{kl}^1(t) - \phi_{kl}^1(s); \quad \Delta \phi_{kl}^2 = \phi_{kl}^2(t) - \phi_{kl}^2(s); \\ \Delta \phi_{kl}^3 &= \phi_{kl}^3(t) - \phi_{kl}^3(s). \end{aligned}$$

Має місце наступна допоміжна лема.

Лема 1. Нехай $\xi_N(t)$ випадковий процес з (6).

Тоді

$$\begin{aligned} E \xi_N(t) &= \sum_{k=N+1}^{\infty} (\phi_{kk}^1(t) + \phi_{kk}^3(t)); \\ D \xi_N(t) &= \sum_{k, l=N+1}^{\infty} (2(\phi_{kl}^1(t))^2 + (\phi_{kl}^2(t))^2 + 2(\phi_{kl}^3(t))^2); \\ D(\xi_N(t) - \xi_N(s)) &= \sum_{k, l=N+1}^{\infty} (2(\Delta \phi_{kl}^1)^2 + (\Delta \phi_{kl}^2)^2 + 2(\Delta \phi_{kl}^3)^2). \end{aligned}$$

Доведення.

Оскільки $\xi_k, \eta_l, k \geq 0, l \geq 0$, - незалежні центровані гауссові випадкові величини з дисперсією 1, то з (7) отримаємо

$$\begin{aligned} E \xi_N(t) &= \sum_{k, l=N+1}^{\infty} (\phi_{kl}^1(t) E \xi_k \xi_l + \phi_{kl}^2(t) E \xi_k \eta_l + \phi_{kl}^3(t) E \eta_k \eta_l) \\ &= \sum_{k=N+1}^{\infty} (\phi_{kk}^1(t) + \phi_{kk}^3(t)) \end{aligned}$$

Для того, щоб знайти дисперсію $\xi_N(t)$, спочатку знайдемо другий момент

$$E(\xi_N(t))^2 = \quad (6)$$

$$E \left(\sum_{k, l=N+1}^{\infty} (\phi_{kl}^1(t) E \xi_k \xi_l + \phi_{kl}^2(t) E \xi_k \eta_l + \phi_{kl}^3(t) E \eta_k \eta_l) \right)^2.$$

Використаємо формулу Іссерліса для центрованих гауссових випадкових величин: $EX_1 X_2 X_3 X_4 = EX_1 X_2 EX_3 X_4 + EX_1 X_3 EX_2 X_4 + EX_1 X_4 EX_2 X_3$. Тоді ми отримаємо

$$\begin{aligned} E(\xi_N(t))^2 &= E \sum_{k, l=N+1}^{\infty} (\phi_{kk}^1(t) \phi_{ll}^1(t) + 2(\phi_{kl}^1(t))^2 + (\phi_{kl}^2(t))^2 + \\ &+ \phi_{kk}^3(t) \phi_{ll}^3(t) + 2(\phi_{kl}^3(t))^2 + 2\phi_{kk}^1(t) \phi_{ll}^3(t)). \end{aligned}$$

Дисперсія випадкового процесу $\xi_N(t)$ дорівнює

$$D\xi_N(t) = E(\xi_N(t))^2 - (E\xi_N(t))^2 = \\ = \sum_{k,l=N+1}^{\infty} (2(\phi_{kl}^1(t))^2 + (\phi_{kl}^2(t))^2 + 2(\phi_{kl}^3(t))^2).$$

Аналогічно, легко довести формулу для дисперсії приростів процесу $\xi_N(t) - \xi_N(s)$. Лему повністю доведено.

Позначимо

$$d_{kl} = \sup_{t \in [0, T]} (2(\phi_{kl}^1(t))^2 + (\phi_{kl}^2(t))^2 + 2(\phi_{kl}^3(t))^2). \quad \text{Тоді}$$

$$\sqrt{D\xi_N(t)} \leq \left(\sum_{k,l=N+1}^{\infty} d_{kl} \right)^{1/2} := \delta_0(N).$$

За певних умов можна показати, що

$$(D(\xi_N(t) - \xi_N(s)))^{1/2} \leq K(N) \cdot |t - s|^{\beta}, \quad \beta \in (0, 1], \quad (9)$$

Де функція $K(N)$ залежить від значення N .

Наступна теорема дає умови, при яких модель наближає дробовий броунівський рух із врахуванням відгуку системи з наперед заданою точністю та надійністю.

Теорема 3. Нехай виконуються умови для (9). Модель $X_N(t)$ наближує дробовий броунівський рух $X_{\alpha}(t)$ з урахуванням відгуку системи (1) з заданою надійністю $1 - \nu$, $\nu \in (0, 1)$ та точністю $\delta > 0$ в просторі $C([0, T])$, якщо для N виконуються нерівності

$$\max\{\delta_0(N), K(N) \cdot (T/2)^{\alpha}\} < \frac{\alpha\delta}{2\sqrt{2}}, \quad \alpha \in (0, 1], \\ 4e^{\frac{3}{\alpha} - \frac{\delta}{2\sqrt{2}\delta_0(N)}} \left(\frac{\delta\alpha}{2\sqrt{2}\delta_0(N)} \right)^{2/\alpha} \left(1 + \frac{2\delta}{\sqrt{2}\delta_0(N)} \right)^{1/2} < \nu,$$

Результати статистичного моделювання (обчислювального експерименту)

Для апробації результатів досліджень було проведено обчислювальний експеримент (моделювання реалізацій дробового броунівського руху).

На рис. 1 представлені реалізації дробового броунівського руху для різних значень індекса Хюрста.

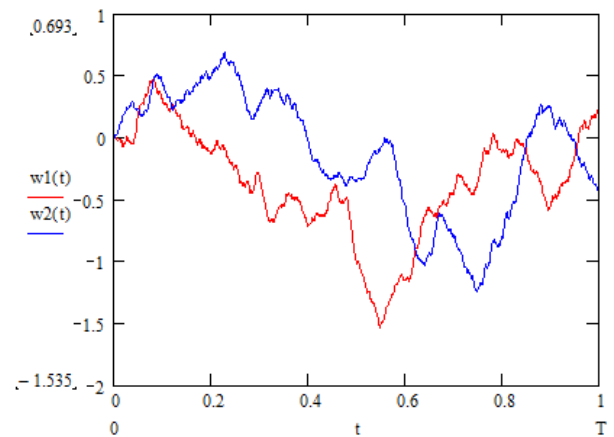


Рис. 1. Реалізації дробового броунівського руху для $\alpha = 0.6$.

На рис. 2 зображені реалізації на вході та виході однорідної лінійної системи з імпульсною функцією $H(\tau) = 1$.

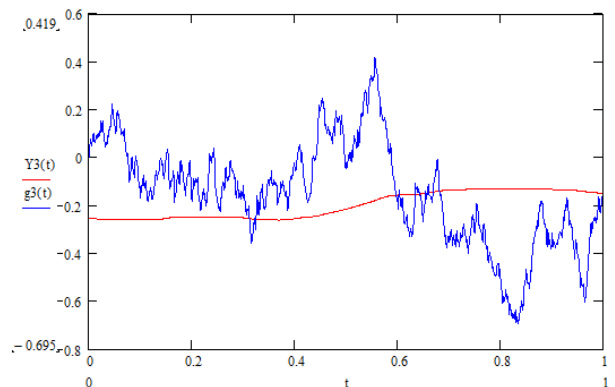


Рис. 2. Реалізації входу (дробовий броунівський рух з $\alpha = 0.5$) на виходу лінійної системи.

На рис. 3 зображені реалізації на вході та виході однорідної лінійної системи з імпульсною функцією $H(\tau) = \exp(-\tau)$.

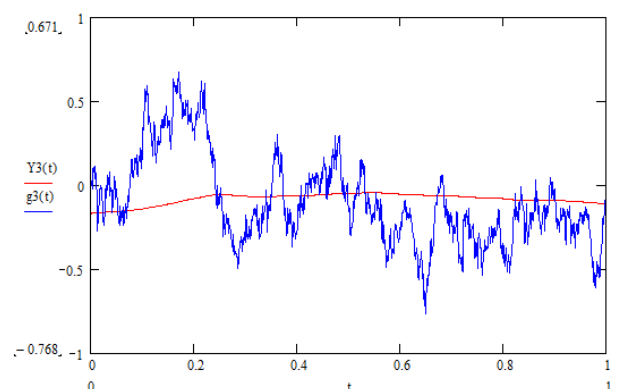


Рис. 3. Реалізації входу (дробовий броунівський рух з $\alpha = 0.4$) на виходу лінійної системи.

Висновки

В роботі досліджено метод моделювання дробового броунівського руху, що використовує його представлення у вигляді випадкового ряду.

Модель будується із заданими точністю і надійністю в просторі неперервних функцій, реалізації можна отримати в будь-який момент часу

Список використаних джерел

1. Mishura Yu. Stochastic calculus for fractional Brownian motion and related processes / Yu. Mishura. - Berlin: Springer, 2008.
2. Сабельфельд К. Методы Монте Карло в краевых задачах / К. Сабельфельд. - Новосибирск: Наука, 1989.
3. Prigarin S. Comparative analysis of two numerical methods to measure Hausdorff dimension of the fractional Brownian motion / S. Prigarin, K. Hahn, G. Winkler // Num. Anal. Appl., - 1, no.2. 2008. - pp. 163–178.
4. Козаченко Ю.В. ϕ -субгауссові випадкові процеси / Ю.В. Козаченко, Р.С. Ямненко, О.І. Василик Ю.. - Київ: ВПЦ «Київський університет», 2008.
5. Kilpi J. Testing the Gaussian approximation of aggregate traffic / J. Kilpi, I. Norros // Proceedings of the second ACM SIGCOMM Workshop, Marseille, France. - 2002. - pp.49-61.
6. Mandjes M. Large Deviations of Gaussian Queues / M. Mandjes. - Chichester: Wiley, 2007.
7. Sheluhin O.I. Similar processes in telecommunication / O.I. Sheluhin, S.M. Smolskiy, A.V. Osin.- John Wiley&Sons Ltd, England, 2007.
8. Козаченко Ю.В. Моделювання випадкових процесів та полів / Ю.В., Козаченко, А.О. Пашко, І.В. Розора. - Київ: Задруга, 2007.
9. Kozachenko Yu. Simulation of stochastic processes with given accuracy and reliability / Yu. Kozachenko, O. Pogoriliak, I. Rozora, A. Tegza. - ISTE Press Ltd, Elsevier Ltd, London, 2016.
10. Козаченко Ю.В. Точність і надійність моделювання випадкових процесів та полів в рівномірній метриці: монографія / Ю.В. Козаченко, А.О. Пашко. - Київ, ТОВ СІК ГРУП Україна, 2016.
11. Dzharidze K. A series expansion of fractional Brownian motion / K. Dzharidze, J. Zanten // CWI. Probability, Networks and Algorithms[PNA] R0216, 2002.
12. Пашко А.О. Точність моделювання субгауссових вінерівських процесів в рівномірній метриці / А.О. Пашко // Журнал обчислювальної та прикладної математики. - 2015. - № 3(120). - С.160–169.

References

1. MISHURA YU. (2008) Stochastic calculus for fractional Brownian motion and related processes. Berlin: Springer.
2. SABELFELD K. (1989) Monte Carlo Methods in Boundary Problems, Novosibirsk: Nauka.
3. PRIGARIN S., HAHN K., WINKLER G. (2008) Comparative analysis of two numerical methods to measure Hausdorff dimension of the fractional Brownian motion, Num. Anal. Appl., 1, no.2, pp.163–178.
4. KOZACHENKO YU., YAMNENKO R., VASYLYK O. (2008) ϕ -sub-Gaussian random process. Kyiv: Vydavnycho-Poligrafichnyi Tsentr "Kyivskiy Universytet".
5. KILPI J., NORROS I. (2002) Testing the Gaussian approximation of aggregate traffic, Proceedings of the second ACM SIGCOMM Workshop, Marseille, France. pp.49-61.
6. MANDJES M. (2007) Large Deviations of Gaussian Queues, Chichester: Wiley.
7. SHELUHIN O., SMOLSKIY S., OSIN A. (2007) Similar processes in telecommunication. John Wiley&Sons Ltd, England.
8. KOZACHENKO YU., PASHKO A., ROZORA I. (2007) Simulation of random processes and fields, Kyiv: "Zadruga".
9. KOZACHENKO YU., POGORILIAK O., ROZORA I., TEGZA A. (2016) Simulation of stochastic processes with given accuracy and reliability. ISTE Press Ltd, Elsevier Ltd, London.
10. KOZACHENKO YU., PASHKO A. (2016) Accuracy and reliability of simulation for random processes and fields in uniform metrics, Kyiv, "Sik Group Ukraine".
11. DZHAPARIDZE K., ZANTEN J. (2002) A series expansion of fractional Brownian motion. CWI. Probability, Networks and Algorithms[PNA], R0216.
12. PASHKO A. (2015) Accuracy of simulation for sub-Gaussian Wiener processes in uniform metrics, Journal of Comp. and Appl. Math., 3(120), pp.160–169.

Надійшла до редколегії 14.11.2018

УДК 519.21

Усар І.Я., к. ф.-м. н.
Макушенко І.А., к. ф.-м. н.
Лукович О.В., інж.

I.Ya. Usar, Ph.D.
I.A. Makushenko, Ph.D.
O.V. Lukovych, Eng.

Про один підхід до аналізу систем з повторними викликами і чергою

On an approach to analyze retrial systems with queue

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
03680, м. Київ, пр-т Глушкова, 4д,
e-mail: usar69@ukr.net

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: usar69@ukr.net

У статті розглядається марковська модель системи з повторними викликами з обмеженою кількістю обслуговуючих приладів, скінченною довжиною черги та скінченною орбітою. В ній вводиться клас двовимірних процесів міграції, в рамках якого можна описувати процес обслуговування для різних систем з повторними викликами. Спосіб надходження і обслуговування вимог (тип системи) обирається за рахунок керуючих параметрів міграції. В роботі проводиться пошук замкнених формул для стаціонарних ймовірностей двовимірного процесу обслуговування через параметри моделі процесу обслуговування. У випадку одного обслуговуючого приладу та одного місця в черзі векторно-матричне подання стаціонарних ймовірностей значно спрощується.

Ключові слова: стохастичні системи, повторні виклики, процеси міграції, стаціонарний режим.

The paper is devoted to the perspective direction of the theory stochastic systems associated with research of retrial queuing systems with queue. A class of bivariate migration processes is introduced to describe the service process of the system. We consider a Markov model of retrial queuing system with the finite number of servers, a finite length queue and a finite orbit. It introduces a class of two-dimensional migration processes, within which we can describe the service process for different retrial queuing systems. The way of receiving and servicing calls (system type) is selected due to the control parameters of migration. In the paper we search an explicit formulas for stationary probabilities of two-dimensional service process through the parameters of the service process model. In the case of one service device and one place in the queue, the vector-matrix representation of stationary probabilities is greatly simplified. The result obtained is used for construction of explicit formulas for stationary probabilities of one service device and one place in the queue.

Key Words: stochastic systems, repeated calls, migration processes, stationary regime.

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

Теорія систем з повторними викликами є одним із важливих розділів теорії масового обслуговування. Такі системи детально розглянуті в монографіях [1],[2]. Математичні моделі систем з повторними викликами широко застосовуються на практиці ([1],[2],[3],[4]).

В системах з повторними викликами і чергою вимога, яка надійшла в систему і застала всі сервери зайнятими, стає у чергу обмеженої довжини. Коли всі місця у черзі зайняті, вона попадає на віртуальну «орбіту» і повторює спробу потрапити на обслуговування через випадковий проміжок часу. Такі вимоги стають

джерелами повторних викликів і генерують вторинний потік.

В даній роботі для описання процесу обслуговування систем з повторними викликами і чергою вводиться клас двовимірних процесів міграції. Тип системи обирається за рахунок керуючих параметрів міграції.

Основну модель, яка розглядається в роботі, визначимо як двовимірний ланцюг Маркова з неперервним часом $Q(t) = (Q_1(t), Q_2(t))$, $t \geq 0$ в обмежених множині станів $S = \{0, 1, \dots, m+n\} \times \{0, 1, \dots, N\}$. Інфінітезимальні

характеристики $q_{\alpha\beta}$, $\alpha, \beta \in S$, $\alpha \neq \beta$ для $Q(t)$
задамо системою співвідношень:

при $\alpha = (i, j)$ та $i \neq m+n$

$$q_{\alpha\beta} = \begin{cases} \lambda_{ij}, & \text{якщо } \beta = (i+1, j), \\ \mu_{ij}, & \text{якщо } \beta = (i-1, j), \\ v_{ij}, & \text{якщо } \beta = (i+1, j-1), \end{cases}$$

при $\alpha = (m+n, j)$

$$q_{\alpha\beta} = \begin{cases} \mu_{m+nj}, & \text{якщо } \beta = (m+n-1, j), \\ \lambda_{m+nj}, & \text{якщо } \beta = (m+n, j+1). \end{cases}$$

За домовленістю інтенсивності тих переходів, які виводять за обмежену область S дорівнюють нулю $\mu_{0j} = v_{i0} = v_{m+nj} = \lambda_{m+nN} = 0$.

Процеси міграції типу $Q(t)$ моделюють роботу марковських систем з чергою та обмеженим числом джерел повторних викликів. Так при

$$\lambda_{ij} = \lambda_{m+nj} = \lambda, \quad \mu_{ij} = i\mu, \quad i = \overline{1, m}, \\ \mu_{ij} = m\mu, \quad i = \overline{m+1, m+n}, \quad v_{ij} = jv$$

отримаємо класичну модель $[M / M / m / m+n]^{(N)}$ системи з чергою та повторними викликами ([1]), для якої m – число обслуговуючих приладів, n – число місць у черзі, N – максимально можливе число джерел повторних викликів.

Перейдемо до аналізу стаціонарного режиму процесу $Q(t)$, $t \geq 0$. Ми маємо на меті отримати для стаціонарних ймовірностей π_{ij} , $(i, j) \in S$ подання, яке зручно використовувати як для обчислення, так і для вивчення аналітичних властивостей.

Для того, щоб сформулювати основний результат, для $j = 0, 1, \dots, N-1$ введемо позначення: $A(j)$ – тридіагональна матриця вигляду

$$A(j) = \begin{pmatrix} a_0^{(0)} & a_0^{(+)} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ a_1^{(-)} & a_1^{(0)} & a_1^{(+)} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2^{(-)} & a_2^{(0)} & a_2^{(+)} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & \dots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{m+n-2}^{(-)} & a_{m+n-2}^{(0)} & a_{m+n-2}^{(+)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & a_{m+n-1}^{(-)} & a_{m+n-1}^{(0)} \end{pmatrix}$$

$$a_i^{(0)} = \lambda_{ij} + \mu_{ij} + v_{ij}, \quad i = 0, 1, \dots, m+n-1$$

$$a_i^{(+)} = -\lambda_{ij}, \quad i = 0, 1, \dots, m+n-2$$

$$a_i^{(-)} = -\mu_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, m+n-1$$

$$B(j) = \begin{pmatrix} 0 & v_{0j+1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & v_{1j+1} & \dots & 0 \\ & & & \dots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & v_{m+n-2j+1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix};$$

$$C(j) = \frac{\mu_{m+nj}}{\lambda_{m+nj}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & v_{0j+1} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & v_{1j+1} \\ & & \dots & & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & v_{m+n-2j+1} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & v_{m+n-1j+1} \end{pmatrix}.$$

Через $A(N)$ будемо позначимо трикутну матрицю

$$A(N) = \begin{pmatrix} \mu_{1N} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -(v_{1N} + \lambda_{1N}) & \mu_{2N} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -v_{1N} & -(v_{2N} + \lambda_{2N}) & \mu_{3N} & \dots & 0 & 0 \\ & & \dots & & & \\ -v_{1N} & -v_{2N} & -v_{3N} & \dots & -(v_{m+n-2N} + \lambda_{m+n-2N}) & \mu_{m+n-1N} \end{pmatrix}$$

Нам також необхідні будуть вектори:

$$\pi'(j) = (\pi_{0j}, \pi_{1j}, \dots, \pi_{m+n-1j}), \quad Q(j) = \frac{\pi(j)}{\pi_{0N}},$$

$$v'(j) = (v_{0j}, v_{1j}, \dots, v_{m+n-1j}), \quad j = 0, 1, \dots, N,$$

$\bar{1}(m+n-1) - (m+n-1)$ – вимірний вектор, що складається з одиниць, $e_i(m+n-1) - (m+n-1)$ – вимірний вектор, i – та компонента якого дорівнює одиниці, а інші дорівнюють нулю. Через $\bar{1}$, e_i будемо позначати такі ж вектори розмірності $m+n$.

Теорема 1. Якщо для $Q(t)$ існує стаціонарний режим і матриці $A(j)$, $j = 0, 1, \dots, N-1$ мають обернену, то стаціонарні імовірності π_{ij} , $(i, j) \in S$ можна подати у вигляді

$$\pi'(N) = S_Q^{-1} Q'(N),$$

$$\pi_{m+nN} = S_Q^{-1} \frac{1}{\mu_{m+nN}} Q'(N) (v(N) + \lambda_{m+n-1N} e_{m+n}), \quad (1)$$

$$\pi'(j) = S_Q^{-1} Q'(N) T(N-1) \times \dots \times T(j), \quad (2)$$

$$\pi_{m+nj} = S_Q^{-1} \frac{1}{\lambda_{m+nj}} Q'(N) T(N-1) \times \dots \times T(j+1) v(j+1), \\ j = 0, 1, \dots, N-1, \quad (3)$$

де

$$S_Q = Q'(N) \left\{ \bar{1} + \frac{1}{\mu_{m+nN}} (v(N) + \lambda_{m+n-1N} e_{m+n}) + \sum_{j=0}^{N-1} T(N-1) \times \dots \times T(j+1) \times \left[T(j) \bar{1} + \frac{1}{\lambda_{m+nj}} v(j+1) \right] \right\}, \quad (4)$$

$$Q(N) = \begin{pmatrix} 1 \\ A^{-1}(N)(v_{0N} \bar{1}(m+n-1) + \lambda_{0N} e_1(m+n-1)) \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$T(j) = [B(j) + C(j)] A^{-1}(j), \quad j = 0, 1, \dots, N-1.$$

Доведення. Для кожного $k = 0, 1, \dots, m+n-1$ розіб'ємо S на дві підмножини $E_k = \{(0, N), (1, N), \dots, (k, N)\}$ та $\bar{E}_k = S \setminus E_k$. В силу рівності потоків імовірностей через замкнений контур у стаціонарному режимі ([3], стор.49), будемо мати

$$v_{0N} \pi_{0N} + v_{1N} \pi_{1N} + \dots + v_{k-1N} \pi_{k-1N} + (v_{kN} + \lambda_{kN}) \pi_{kN} = \mu_{k+1N} \pi_{k+1N}, \quad k = 0, 1, \dots, m+n-1. \quad (6)$$

$$\text{Для } Q_{ij} = \frac{\pi_{ij}}{\pi_{0N}}, \quad (i, j) \in S \text{ перші } (m+n-1)$$

рівняння із системи (6) мають вигляд

$$\begin{cases} \mu_{1N} Q_{1N} = v_{0N} + \lambda_{0N} \\ -(v_{1N} + \lambda_{1N}) Q_{1N} + \mu_{2N} Q_{2N} = v_{0N} \\ -v_{1N} Q_{1N} - (v_{2N} + \lambda_{2N}) Q_{2N} + \mu_{3N} Q_{3N} = v_{0N} \\ \dots \\ -v_{1N} Q_{1N} - \dots - (v_{m+n-2N} + \lambda_{m+n-2N}) Q_{m+n-2N} + \mu_{m+n-1N} Q_{m+n-1N} = v_{0N} \end{cases} \quad (7)$$

Відносно $Q_{1N}, \dots, Q_{m+n-1N}$ розв'язком (7) буде

$$\begin{pmatrix} Q_{1N} \\ \dots \\ Q_{m+n-1N} \end{pmatrix} = A^{-1}(N)(v_{0N} \bar{1}(m+n-1) + \lambda_{0N} e_1(m+n-1)).$$

Таким чином (5) доведено.

З (6) при $k = m+n-1$ знаходимо

$$Q_{m+nN} = \frac{1}{\mu_{m+nN}} Q'(N)(v(N) + \lambda_{m+n-1N} e_{m+n}). \quad (8)$$

Узагальнимо співвідношення (8) на випадок $j = N-1, \dots, 1, 0$. Розіб'ємо S на дві підмножини $S_j = \{(\alpha, \beta) \in S : \beta \leq j\}$ і $\bar{S}_j = S \setminus S_j$. Знову

використовуючи рівність потоків ймовірностей через замкнений контур, маємо

$$\lambda_{m+nj} Q_{m+nj} = v_{0j+1} Q_{0j+1} + \dots + v_{m+n-1j+1} Q_{m+n-1j+1}$$

або

$$Q_{m+nj} = \frac{1}{\lambda_{m+nj}} Q'(j+1) v(j+1), \quad j = N-1, \dots, 0. \quad (9)$$

Розглянемо тепер $(m+n) \times N$ замкнених контурів, які містять одну точку (i, j) з області $\bar{S} = \{0, 1, \dots, m+n-1\} \times \{0, 1, \dots, N-1\}$. Відповідні рівняння для Q_{ij} , $(i, j) \in \bar{S}$ мають вигляд

$$(\lambda_{0j} + v_{0j}) Q_{0j} = \mu_{1j} Q_{1j}, \quad i = 0, \quad (10)$$

$$(\lambda_{ij} + \mu_{ij} + v_{ij}) Q_{ij} = v_{i-1j+1} Q_{i-1j+1} + \lambda_{i-1j} Q_{i-1j} + \mu_{i+1j} Q_{i+1j}, \quad i = 1, 2, \dots, m+n-2. \quad (11)$$

При $i = m+n-1$ з урахуванням (9)

$$(\lambda_{m+n-1j} + \mu_{m+n-1j} + v_{m+n-1j}) Q_{m+n-1j} = v_{m+n-2j+1} Q_{m+n-2j+1} + \lambda_{m+n-2j} Q_{m+n-2j} + \frac{\mu_{m+nj}}{\lambda_{m+nj}} Q'(j+1) v(j+1). \quad (12)$$

Систему (10)-(12) можна подати у векторно-матричному вигляді

$$Q'(j) A(j) = Q'(j+1) [B(j) + C(j)], \text{ або}$$

$$Q'(j) = Q'(j+1) [B(j) + C(j)] A^{-1}(j) = Q'(j+1) T(j), \quad j = N-1, \dots, 1, 0, \quad (13)$$

оскільки за умовою $A^{-1}(j)$ існує.

Розв'язком рекурентного співвідношення (13) буде послідовність векторів

$$Q'(j) = Q'(N) T(N-1) \times \dots \times T(j), \quad j = N-1, \dots, 1, 0. \quad (14)$$

Підставляючи праву частину (14) в (9), маємо

$$Q_{m+nj} = \frac{1}{\lambda_{m+nj}} Q'(N) T(N-1) \times \dots \times T(j+1) v(j+1), \quad j = N-1, \dots, 1, 0. \quad (15)$$

Тепер умова нормування для стаціонарних ймовірностей π_{ij} , $(i, j) \in S$ дозволяє знайти

$$\begin{aligned} \pi_{0N} = & \left\{ Q'(N) \bar{1} + \sum_{j=0}^{N-1} Q'(N) T(N-1) \times \dots \times T(j) \bar{1} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\mu_{m+nN}} Q'(N)(v(N) + \lambda_{m+n-1N} e_m) + \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{\lambda_{m+nj}} Q'(N) T(N-1) \times \dots \times T(j+1) v(j+1) \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (16)$$

Співвідношення (1)-(3) є безпосереднім наслідком (8), (14)-(16). Теорему доведено.

Отриманий результат можна застосувати до системи $[M / M / m / m + n]^{(N)}$ з повторними викликами і чергою. У даному випадку залежність локальних характеристик від точки $(i, j) \in S$ фазового простору має простий явний вигляд і можна провести більш детальний аналіз.

Лема 1. Для $[M / M / m / m + n]^{(N)}$ - системи з повторними викликами і чергою

$$Q_{kN} = \frac{(\lambda / \mu)^k}{k!} \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} \prod_{j=0}^{i-1} \left(j \frac{\mu}{\lambda} + N \frac{\nu}{\lambda} \right),$$

$$k = 0, 1, \dots, m-1,$$

де $\binom{k}{i} = \frac{k!}{i!(k-i)!}$ і за домовленістю $\prod_i \dots = 1$, при $j < i$.

Очевидно, формули (1)-(4) представляють собою ефективну рекурентну процедуру для обчислення стаціонарного розподілу. У випадку одного обслуговуючого приладу та одного місця в черзі векторно-матричне подання стаціонарних ймовірностей значно спрощується.

Будемо вважати $\mu = 1$.

Наслідок 1. Для $[M / M / 1 / 1 + 1]^{(N)}$ - системи з повторними викликами і чергою

$$\pi(0, j) = S^{-1}(N) \frac{\rho^j}{1 + \rho + \lambda + j\nu} \varphi(j), \quad (17)$$

$$\pi(1, j) = S^{-1}(N) \rho^j \frac{\lambda + j\nu}{1 + \rho + \lambda + j\nu} \varphi(j), \quad j = 0, 1, \dots, N, \quad (18)$$

$$\pi(2, j) = S^{-1}(N) \rho^j \frac{\Lambda(j)(1 + \lambda + j\nu)}{(1 + \rho + \lambda + j\nu)(1 + \rho + \lambda + (j+1)\nu)} \times \varphi(j), \quad j = 0, 1, \dots, N-1, \quad (19)$$

Список використаних джерел

1. Falin G.I. Retrial Queues / G.I. Falin, J.G.C. Templeton. – London Chapman & Hall, 1997. – 331 p.
2. Artalejo J.R. Retrial Queueing Systems. A Computational Approach / J.R. Artalejo, A. Gomes-Corral. – Springer-Verlag, 2008. – 318 p.
3. Уолрэнд Дж. Введение в теорию массового обслуживания. – М.: Мир, 1993. – 336 с.
4. Anisimov V.V. Analysis of Markov multiserver retrial queues with negative arrivals / V.V. Anisimov, J.R. Artalejo // Queueing Systems. – 2001. – Vol.39. – P. 157-182.

$$\pi(2, N) = S^{-1}(N) \rho^N \frac{\Lambda(N)}{1 + \rho + \lambda + N\nu} \varphi(N),$$

де $\rho = \frac{\lambda}{\mu} = \lambda$ завантаження системи первинними викликами,

$$\Lambda(j) = (\lambda + j\nu)(1 + \lambda + j\nu) - \lambda,$$

$$\varphi(j) = \prod_{i=0}^{j-1} \frac{\Lambda(i)}{(i+1)\nu(1 + \rho + \lambda + i\nu)}, \quad j = 0, 1, \dots,$$

а $S(N)$ - нормуюча константа.

Щоб отримати формули для $[M / M / 1 / 1 + 1]$ - системи, перейдемо до границі при $N \rightarrow \infty$.

Наслідок 2. Якщо для $[M / M / 1 / 1 + 1]$ - системи з повторними викликами і чергою $\rho < 1$, то для неї існують стаціонарні імовірності

$$\pi(0, j) = S^{-1} \frac{\rho^j}{1 + \rho + \lambda + j\nu} \varphi(j), \quad (20)$$

$$\pi(1, j) = S^{-1} \rho^j \frac{\lambda + j\nu}{1 + \rho + \lambda + j\nu} \varphi(j) \quad (21)$$

$$\pi(2, j) = S^{-1} \rho^j \frac{\Lambda(j)(1 + \lambda + j\nu)}{(1 + \rho + \lambda + j\nu)(1 + \rho + \lambda + (j+1)\nu)} \varphi(j),$$

$$j = 0, 1, \dots, \quad (22)$$

де

$$S = \sum_{j=0}^{\infty} \rho^j \frac{1 + \lambda + j\nu}{1 + \rho + \lambda + j\nu} \left[1 + \frac{\Lambda(j)}{1 + \rho + \lambda + (j+1)\nu} \right] \varphi(j).$$

В даній роботі для обчислення стаціонарних ймовірностей отримані явні формули в векторно-матричному вигляді. Вони є зручними як для обчислення так і розв'язку оптимізаційних задач. Прості формули, подібні (17)-(19), (20)-(22) можуть бути отримані для інших типів міграцій, що визначаються вибором залежності локальних характеристик від фазової точки області S .

References

1. FALIN G.I., TEMPLETON J.G.C. (1997) *Retrial queues*. London Chapman & Hall.
2. ARTALEJO, J.R., GOMES-CORRAL, A. (2008) *Retrial Queueing Systems. A Computational Approach*, Springer-Verlag.
3. WALRAND, J. (1993) *An Introduction to queueing systems*, Moscow.
4. ANISIMOV V.V., ARTALEJO J.R. (2001) "Analysis of Markov multiserver retrial queues with negative arrivals" *J. Queueing Systems*. Vol.39., p.p. 157-182.

Надійшла до редколегії 23.11.2018

РАДІОФІЗИКА

УДК 616-073.757.1

Даник А.Ю., аспірант¹

Проблема впливу розсіяного випромінювання у рентгенівській діагностиці

¹Факультет радіофізики, електроніки та
комп'ютерних систем

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, м. Київ, пр-т. Акад. Глушкова
4-е

email: AntonDanik@gmail.com

Danyk A.Y., PhD student¹

The problem of scattered radiation in X-ray imaging

¹Faculty of Radiophysics, Electronics and Computer
Systems

National Taras Shevchenko University of Kyiv
Ukraine, Kyiv, Acad. Glushkova av., 4-e

email: AntonDanik@gmail.com

Розглянуто та порівняно різні методи рішення проблеми впливу розсіяного випромінювання на рентгенівські зображення: простота та ефективність методів пригнічення розсіяного випромінювання протиставляються гнучкості та безпечності (зменшення дозового навантаження) методів оцінки та компенсації впливу рентгенівського випромінювання. Рішення в основі яких лежить використання результатів Монте-Карло симуляції у поєднанні із методом суперпозиції ядер розсіювання відзначено як найбільш перспективні.

Ключові слова: рентгенівське зображення; розсіяне рентгенівське випромінювання; протирозсіюючий растр; суперпозиція ядер розсіювання.

Different solutions of the scattered radiation problem in X-ray imaging are reviewed and compared: simplicity and efficiency of the scatter suppression techniques (anti-scatter grid, air gap, slit scheme) are contrasted to the flexibility and safety (dose reduction) of scatter estimation/compensation techniques (hardware methods: beam stoppers application, dark field; software methods: analytical approximation, Monte-Carlo simulation based approaches, scattering kernels superposition technique). Large enough air gap filters scattered radiation as good as high-quality anti-scatter grid while providing dose reduction in cost of X-ray apparatus size increasing. Scatter estimation/compensation software techniques could resolve the problem requiring less radiation dose than hardware techniques do but in cost of greater computing resources. Monte-Carlo based approaches in conjunction with kernels superposition idea is admitted as the most promising.

Key Words: X-ray image; scattered X-ray radiation; anti-scatter grid; kernels superposition.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов І.О.

1. Introduction

X-ray imaging is based on the simple idea of getting the shadow pictures of the object in X-rays. Generally, X-ray apparatus should include such important parts as the source of the X-ray radiation and the detector sensible to the radiation emitted by the source. Object is placed between the source and the detector such way that radiation emitted by the source passes through the object's volume of interest and reaches the detector. Due to the interaction with the object's substance, the X-ray radiation photons may undergo the absorption, scattering, or freely pass the object as presented on fig.1.

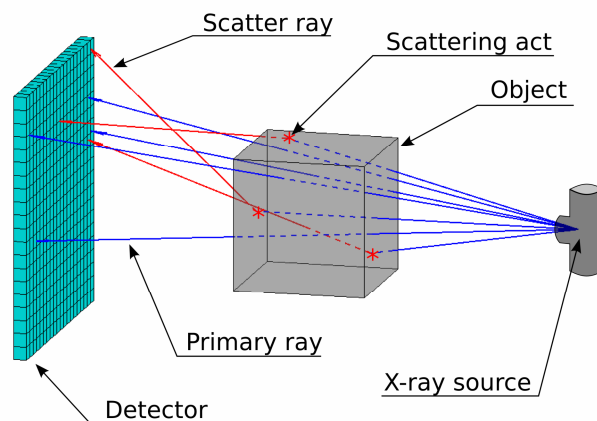


Figure 1 X-ray imaging scheme

Primary radiation is a part of the initial X-ray source radiation that has passed the object without interactions with object's substance. This radiation produces a shadow picture of the object's volume of interest. Radiation of scattered X-ray photons mainly caused by Compton and Rayleigh processes is almost non-collinear to the primary radiation [1]. So scattering distorts the resulting X-ray image contrast and sharpness adding an extra noise and uneven background to the resulting X-ray image. The Hounsfield Scale of image is also become distorted. Thus scattered radiation compensation is an important task especially for medical imaging.

Solutions of the "scattered radiation" problem in X-ray imaging can be divided into two groups: "scattered radiation suppression" - methods, whose main goal is reduction of the amount of the scattered radiation that takes part in the X-ray image formation; "scattered radiation estimation and compensation" – methods, whose main goal is correction of the X-ray image that was formed under scattered radiation influence. In this paper different approaches for scattering compensation in X-ray imaging are compared and the most optimal approach for scatter suppression, flexibility and safety is evaluated. The feasible ways of this approach improvement are suggested.

2. Scattered radiation suppression

The general principle for suppression of the scattered X-ray radiation is in the fact that the main part of the scattered X-ray radiation is non-collinear to the primary X-ray radiation. The most common methods using this idea are "air-gap variation", "slit-scheme" and anti-scatter grid.

To compare the methods of this section let's use "selectivity" (ξ) parameter [2]. This parameter is defined by relations between scattered and primary radiation with (δ') and without (δ) grid as follows: $\xi = \delta / \delta'$.

Anti-scatter grid

Anti-scatter grid is the most common solution of the scattered radiation problem. Anti-scatter grid is a grid of metal plates (for example lead) oriented to the focus of the X-ray source as shown on fig.2.

Anti-scatter grid's properties are mostly determined by grid's materials, focal distance F , grid frequency N , grid ratio r , plates' thickness D and gaps' thickness d (fig.2).

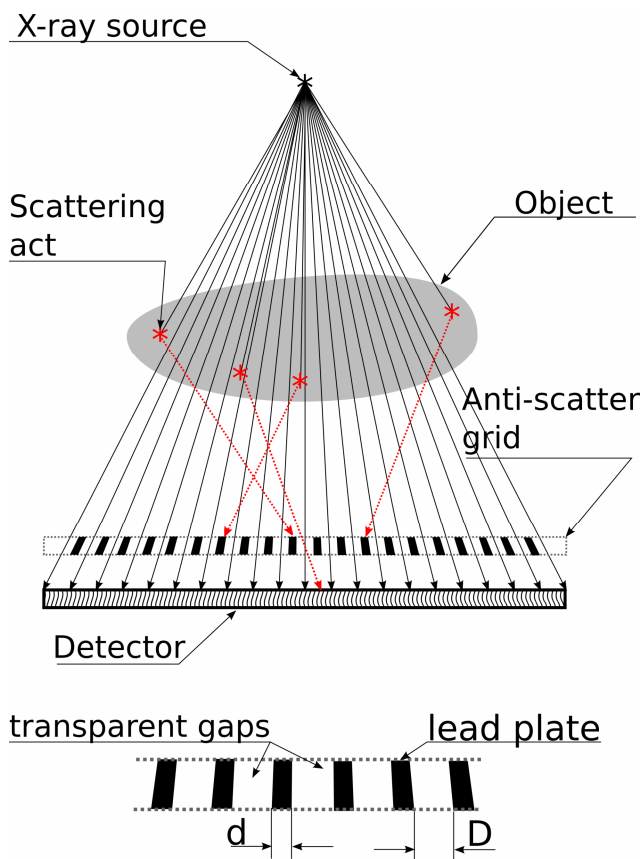


Figure 2 Anti-scatter grid scheme

Anti-scatter grid frequency N (the number of plates per 1 cm) and grid ratio r are defined as

$$N = \frac{1}{d + D}$$

$$r = \frac{h}{D}$$

All mentioned grid's parameters (especially grid ratio), X-ray apparatus configuration, X-ray apparatus and grid collimation (grid should be focused on the X-ray source focus) as while as studied object may influence grid transparency for both scattered and primary radiation. The transparency of the grid is determined by its transmission coefficients T_P and T_S for primary and scattered radiation appropriately. In terms of transmission coefficients, grid selectivity is equal to:

$$\xi = \frac{\delta}{\delta'} = \frac{T_P}{T_S}$$

Anti-scatter grid greatly suppresses scattered radiation but in the same time primary radiation is also suppressed. To describe how much radiation in total passed through the grid the transmission coefficient for total radiation (sum of the primary and the scattered radiation) is used. This parameter is

highly depended on the studied object - in some cases the primary radiation prevails, in other cases scattered radiation prevails. The loss in intensity of radiation sensed by the detector should be compensated by increasing of X-ray source intensity that leads to proportional increasing of the absorbed dose. X-ray source intensity increasing or dose increasing is described by the Bucky factor: $B = I / T_i$.

Typical grid parameters for 90 keV X-ray tube and 20 cm acrylic phantom [3] are presented in the tab.1

Table 1

Typical grid parameters					
r	T_s	T_p	ξ	T_t	B
6:1	0.194	0.623	3.21	0.310	3.23
12:1	0.078	0.533	6.83	0.197	5.07
16:1	0.050	0.506	10.12	0.154	6.50

Despite the strong scattered radiation suppression, anti-scatter grid has a few disadvantages, prompting in many cases to seek an alternative. The main disadvantages are as follows.

Application of anti-scatter grid (see Bucky factor in tab.1) leads to significant signal decrease and in turn to contrast and signal-to-noise decrease. Bucky factor compensation requires increasing of the X-ray exposure that leads to proportional increasing of the radiation dose absorbed by studied object, that is strongly unwanted in case of medical imaging.

Anti-scatter grid, just like the studied object, participate in image formation and resulting X-ray image contains the image of anti-scatter grid.

Anti-scatter grid requires very good collimation of the X-ray system. Focal points of the X-ray source and the anti-scattered grid should coincide, otherwise anti-scatter grid transparency deteriorates and artifacts occur.

Anti-scatter grid increases the mass and the size of the system that in some cases is strongly unwanted (for example in computed tomography, CT).

In case of latest CT scanners' generation, it is hard to construct the detector with anti-scatter grid (detector in such systems should be sensitive to X-rays in a wide angles' range)

Air-gap

Another way to reduce the amount of the scattered radiation in the detector plane is increasing the distance (air gap size) between the studied object and the detector. This scheme, presented on the fig.3,

requires "point" X-ray source (with small focus). The method is based on the idea that the radiation intensity from such source will decrease inversely proportional to the square of the distance from the source.

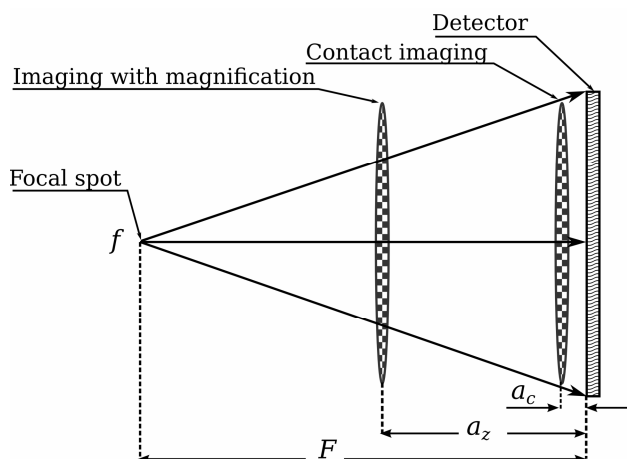


Figure 3 Air-gap scheme

In case of small "air gap" (contact imaging), relation between scattered and primary radiation is given by

$$\delta = C \left(\frac{F}{a_c} \right)^2,$$

where, C - proportionality factor, a_c - object-detector distance and F – focal spot – detector distance.

In case of greater "air gap" (imaging with magnification)

$$\delta' = C \left(\frac{F}{a_z} \right)^2,$$

where, a_z - object-detector distance.

Then, "air gap" selectivity is given by simple expression

$$\xi = \frac{\delta}{\delta'} = \left(\frac{a_z}{a_c} \right)^2$$

As it evident from the scheme, air gap leads to magnification of the object image that is defined by magnification coefficients as follows

$$m_c = \frac{F}{F - a_c}; m_z = \frac{F}{F - a_z}$$

Then selectivity in terms of magnification coefficients is

$$\xi = \left(\frac{(m_z - 1)m_c}{(m_c - 1)m_z} \right)^2$$

Assume “contact imaging” with small magnification $m_c = 1.4$, then for greater “air gap” selectivity will depend on magnification as shown on fig.4

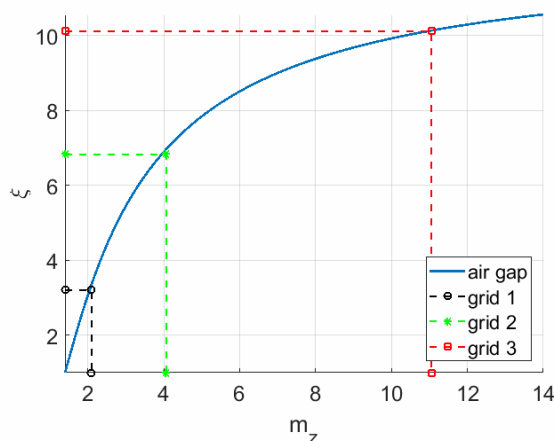


Figure 4 Air-gap selectivity as function of magnification

Comparing of “anti-scatter grid” and “air gap” methods it is easy to see that “air gap” with fivefold magnification and anti-scatter grid with ratio 16:1 have similar selectivity. It means that air gap technique with fivefold magnification filters scattered radiation as good as high-quality anti-scatter grid. In the same time the air gap method is deprived of the most anti-scatter grid disadvantages. There is no primary radiation suppression, and thus a dose is lower. There is no anti-scatter grid image presented on the resulting X-ray image. There is no need in precise collimation or anti-scatter grid (cheaper).

Nevertheless, there are few disadvantages present.

In most cases it is hard to make a large enough air gap (especially for CT). Due to magnification the detector size should be adjusted.

In general, the literature sources state that when it's possible to make a large enough air gap it gives better results than application of an anti-scatter grid. In chest radiography studies [4] air gap comparing to anti-scatter grid leads to increasing of contrast with the same dose for a posteroanterior projection and to decreasing of the dose with slightly decreased contrast in case of lateral projection. In cephalometric radiography studies [5] an air gap

comparing to an anti-scatter grid leads to better selectivity and signal-to-noise ratio improvement. The dose was reduced more than twice.

Slit-scheme

The main idea of this method is to replace imaging in wide beam by scanning the studied object with highly collimated narrow spot beam (pencil beam), as shown on fig.5.

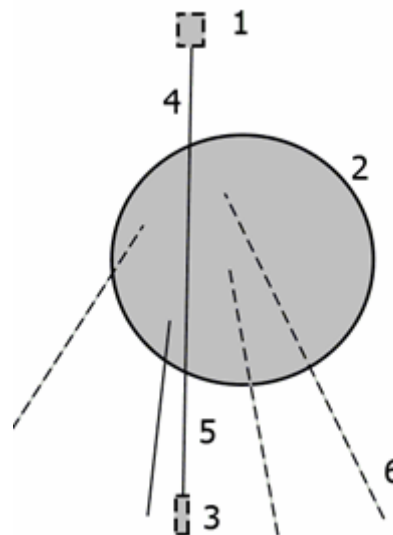


Figure 5 slit scheme: 1)X-ray source; 2) studied object; 3) detector; 4) incident ray; 5) primary ray; 6) scattered ray

Amount of scattered radiation is reduced proportionally to changes in irradiated area. Smaller irradiated area leads to less amount of scattering centers. With or without highly collimated detector, slit scheme dramatically suppresses scattered radiation and usually gives results that don't require further scattering corrections.

Despite the fact of good scattered radiation suppression, this method has serious disadvantages that strongly limit its application. Method requires a lot of time to make an image. It does not allow to scan moving objects (chest for example). Collimation causes a large thermal load on equipment.

3. Scattered radiation estimation and compensation

Instead of reducing the amount of the scattered radiation incident on the detector, methods of this category deal with the influence of the scattered radiation on the X-ray image after its registration. X-ray radiation sensed by the detector (M) is a sum of the primary radiation (P) and the scattered radiation (S). In case of known scattered radiation the primary

radiation can be restored from the total radiation sensed by the detector using a simple subtraction (compensation) as follows: $P = M - S$.

Method of this group can be split into two subgroups: hardware and software methods. The main goal for both is to provide an estimation of the scattered radiation, but the way how they approach the result is different. The first one mostly relies on physical measurements of studied object. The later relies on numerical calculations.

Hardware methods

Hardware methods estimate scattered radiation by registering it during the experiment with the same X-ray apparatus and phantom similar to the studied object. Estimation may be even performed simultaneously with the main X-ray examination using several techniques: beam-stop schemes and dark field measurements.

Hardware methods of scattered radiation estimation could be used not only for estimation/compensation procedure but also for study or validation of suppression techniques [6], where air gap and anti-scatter grid effectiveness were studied and compared using beam stop technique.

Beam-stop

Schematically the beam stop scheme principle is shown on fig.6.

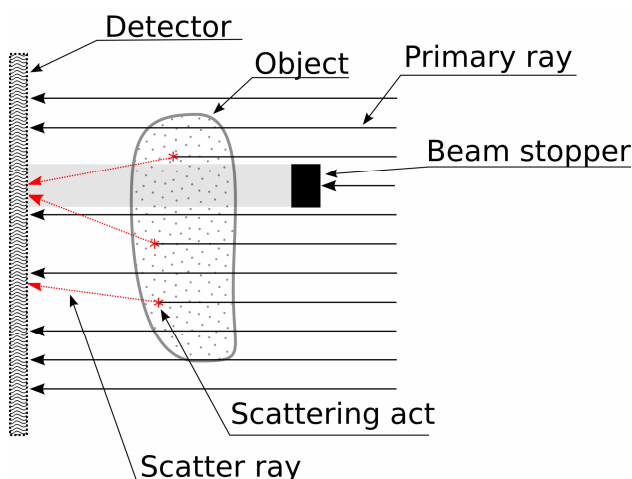


Figure 6 Beam stop scheme

The main idea is to place a stopper between the X-ray source and the studied object such way that stopper absorbs all the primary radiation. Thus the radiation detected in the area of stopper's projection shadow consists of the scattered radiation only. Stoppers array placed between the X-ray source and the studied object may be applied for estimation of

scattered radiation distribution by interpolation. This technique could be used during the conventional X-ray examination but the resulting X-ray image will contain image of the stoppers. In order to avoid presence of stoppers on the resulting image it is necessary to perform multiple examinations: with and without stoppers or with different stoppers locations.

Despite the fact that each mentioned configuration has been admitted by their authors as a working solution, all they have the same problem: resulting X-ray image contains the image of beam stoppers. This problem can be solved by additional examination, as it was mentioned above. When a patient needs a series of examinations the images with beam stoppers can be scanned only once to save the resulting scatter radiation estimation in a library [7, 8]. For all next X-ray examinations, the scattered radiation is recovered from the library.

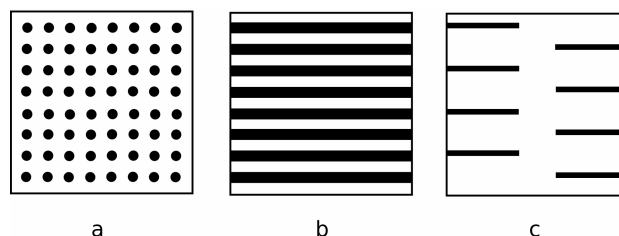


Figure 7 Beam stop arrays configurations

It may be concluded, that despite the fact of good scattered radiation estimation the beam stop technique has a few disadvantages. Elimination of beam stoppers presence in the resulting X-ray image requires dose increase. Array of beam stoppers make the X-ray apparatus more complicated and heavy that may cause problems with CT.

Dark field

Generally, X-ray apparatus is focused to examine some object's area by collimator. Collimator parts can be used as beam stopper in order to obtain areas with blocked primary radiation. Radiation detected in the collimator's shadow contains only the scattered radiation. This scheme, as shown on fig.8, requires a larger detector to register not only the object's region of interest but also the collimator shadow region.

This method works well only the in cases of homogenous objects with symmetry (breast examination for example) [9]. Such objects produce scatter radiation that can be restored with a good accuracy from data registered in the collimator shadow. Obviously in other cases the data sampled

only on the borders of field of view is not enough for recovering of scatter radiation distribution.

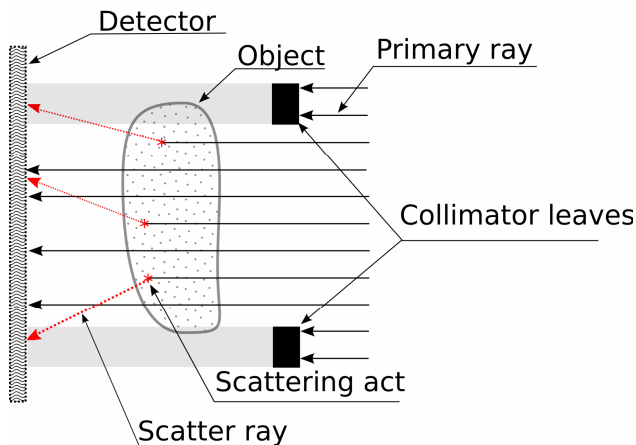


Figure 8 "Dark field" scheme

In contrast to the beam stop method this one doesn't offer dose increasing. Nevertheless, in most cases it provides significantly worse scatter radiation estimation accuracy and can be used only as first approximation for software methods.

Software methods

Software methods use information about the X-ray apparatus and the object (such as geometry, intensity, spectrum, kind of materials etc.) to make a prediction of the scatter radiation distribution. Analytical approximation methods are proposed to estimate scatter radiation analytically using numerous simplifications including simplified model of the object and simplified physics equations. Realistic simulation techniques were proposed to simulate interaction of the X-ray radiation using phantom similar to the studied object in order to obtain scatter radiation estimation. Scattering kernels superposition methods were proposed to split the studied object into sub-regions with quasi-homogenous scattering properties and describe the resulting scatter radiation as the algebraic sum of the scatter radiation given by each sub-region.

Analytical approximation

Usually analytical methods are applicable only to simple homogenous or heterogeneous smooth geometry objects. Even in such cases, the problem still remains too complex to find the exact solution and to simplify it. In the most works only the Compton process is accounted neglecting Rayleigh scattering as while as multiple scattering processes.

One of the simplest scatter radiation estimations is made for model presented on the fig.9 [10]. Object assumed to be an infinite plate of constant thickness t located on the distant g from the detector (g is the size of the air gap) and irradiated by mono-energetic "pencil" beam (beam with very small width that can be described by Dirac delta function) that falls normally to the surface of the object.

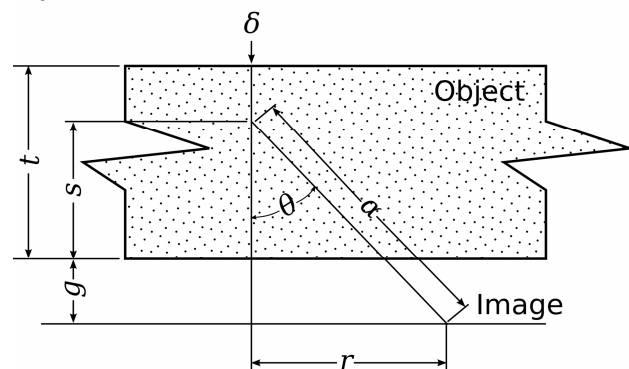


Figure 9 Simple homogenous model

After applying the simplified Klein-Nishina formula for Compton scattering (differential cross section) and Berr-Lambert law for primary radiation attenuation the scattered radiation estimator looks like expression (1), where, $\theta = \tan^{-1}[r/(s+g)]$; $\alpha = [s/(s+g)] [r^2 + (s+g)^2]^{1/2}$; μ_p , μ_s - effective linear attenuation coefficients of the primary beam and scattered radiation respectively; K is the experimental constant dependent on the object thickness, beam energy and objects material. This constant eliminates the dependence on the X-ray source intensity by normalization of this source intensity such that total area integral I_s become equal to the scatter-to-primary ratio $SPR = \int_{-\infty}^{\infty} I_s(r)dr$ for given object thickness and source spectrum. Value of SPR can be experimentally measured or numerically estimated [11].

The analytical model is closely correlated to Monte-Carlo simulation results with respect to mentioned constant K [11].

Significant improvements of this scheme were proposed in [12]. Authors introduce up to two materials (heterogeneous model) the more complicated but still smooth geometry (tested on the slabs and cylinder), poly-energetic spectrum of X-ray source.

Using Monte-Carlo simulation of X-ray interaction with simple phantoms, like slabs, cylinders with one layer of material (homogeneous case) or two layers of material (heterogeneous case) authors proved that this model predicts the shape of

the scatter radiation distribution with high accuracy (from 2% error for mono-energetic case and up to 8% error in poly-energetic case).

Analytical models are useful for estimation of the Point Spread Functions or scattering kernels

(distribution of the scatter radiation for irradiation of the homogeneous object by a “pencil” beam). Independent analytical methods are weak because the studied object is strictly non-homogeneous object unknown density distribution.

$$I_s(r) = K \int_0^\infty \exp[-(t-s)] \exp(-\mu_s \alpha) (2 \sin \theta - \sin^3 \theta) \left(\frac{1}{s+g} \right) \left[1 + \left(\frac{r}{s+g} \right)^2 \right] dr \quad (1)$$

Realistic simulation

Simulation of X-rays interaction with realistic phantoms is the numerical solution of the problem of X-ray propagation through the nonhomogeneous medium including: X-rays tube, collimators, air, model of the studied object or phantom and the detector. The common simulation technique is the Monte-Carlo simulation.

Model consists of different objects described by attributes, like coordinates, phase, velocity, energy, object class etc.

Object class defines object attributes limits and possible interactions with other objects (for example, absorbing of the photon by the water phantom) or phenomenon like birth or radioactive decay that are defined by modelled physics.

Each process describes interaction between objects like photon birth inside the X-ray source, Compton scattering, photoelectric effect, etc. Processes may lead to some combination of changing of the interacted objects attributes (velocity and energy of the photon due to Compton scattering), death of interacted object or objects (absorbing of the photon during photoelectric effect), birth of some new objects (emission of the photon by X-ray source).

Result of each mentioned “process” are defined by the probability distribution, for example photon birth inside the X-ray source can be defined by Poisson distribution, it’s energy distribution is defined by the spectrum of the X-ray source, it’s initial coordinate and velocity distribution are defined by geometry and X-ray source emission indicatrix etc. The parameters’ values are estimating through the randomization.

Time is discrete and computation is performed by time steps. At first all processes except motion are computed, changing of coordinates is computed after that.

In contrast to analytical models which are based on lots of simplifications simulation can theoretically “compute everything”, and the quality of the scatter radiation prediction depends on amount of computer

resources or simulation time. The more physics is taken into account for the simulation, the more reliable the result should be. Increasing of computational accuracy (decrease the time step, increase the “digital size” of attributes etc.) also should lead to better result, but may dramatically increase the computational time.

There are lots of programs for simulating interactions of the matter with radiation using Monte-Carlo method are available today. The most commonly used are Geant4 [13] and GATE [14] (Geant4 Application for Tomographic Emission) that encapsulates the Geant4 libraries in the simulation toolkit adapted to the field of nuclear medicine – CERN open source project that is being developed and maintained by an international collaboration.

EGS4 [15] (Electron Gamma Shower), originally developed at Stanford Linear Accelerator Centre and now is an open source project maintained by the National Research Council of Canada - EGSnrc [16].

ITS [17] is an open source project maintained by Sandia National Laboratories.

MCNP (stands for Monte Carlo N-Particle) [18] is a project of Los Alamos National Laboratory. It has common roots with ITS.

PENELOPE (Penetration and ENergy LOss of Positrons and Electrons) [19] is an open source project.

PARTRAC (PARTicle TRACKs) [20, 21].

LEPTS (Low-Energy Particle Track Simulation, [22]) has been integrated into the Geant4 [23]

EPOTRAN (Electron and POSitron TRANsport) [24].

Mentioned programs are compared in [25]. They mostly differ by physical models (models of interactions), databases (their origin and nature), output data format and user interface. Two projects that most frequently advised are: Geant4 - free open source project that requires some programming skills; MCNP – more user-friendly then previous one but has some using restrictions.

Simulation can recreate the scatter radiation obtained during the X-ray examination. The accuracy depends on how the simulated object’s

structure is close to the studied object. Object structure, in some cases, could be well predicted from additional information like kind of object (breast, head, chest etc.), geometrical sizes and shape, anamnesis, CT or MRI images etc. In this case studied object is simulated in accordance with its structure prediction and then result of the simulation is used for compensation procedure. In the case of breast imaging scatter radiation could be estimated by Monte Carlo simulation with a good accuracy [26]. In [27] authors proposed to use the result of planning CT for prediction of the studied object structure (to construct the object model) and shown that Monte Carlo simulation with such object's model gives good results by adequate time that was achieved by GPU parallelization. When the accuracy of the object's structure prediction is not enough it is possible to construct iterative procedure, like one presented on the fig.9, which simply updates the object's structure prediction in order to minimize the difference between X-ray images obtained during the simulation and real X-ray examination. The efficiency of Monte Carlo based iterative procedure that resembles the scheme shown on the fig. 10 has been demonstrated [28, 29].

Monte Carlo simulation is efficient instrument used, mostly, in iterative schemes to improve the results of CT imaging. It gives good estimation for scatter radiation and doesn't require additional scanning or dose increasing but in the same time may require a lot of computational resources (a lot of time for providing a series of MC simulations). Using of GPU parallelization with different strategies such as projection de-noising, CT image down-sampling, and interpolation along the angular direction may improve the quality to processing time ratio [27]. In planar X-ray imaging (radiography), in contrast to CT, Monte Carlo simulation may be less efficient due to the lack of information about the studied object structure (it is hard to reconstruct the object from only one projection).

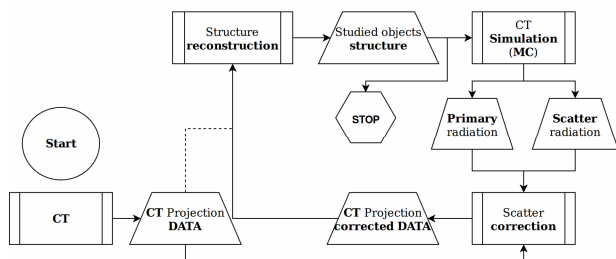


Figure 10 Monte Carlo based iterative scheme for scatter compensation

Image oriented methods

In many cases the scatter radiation could be represented as low-frequency smooth signal. Thus it can be obtained by filtering of the X-ray images using standard methods of image filtration, for example high-pass filtering [30] or segmentation. For homogenous simple objects filtering may be useful but in case of most medical applications the object is strongly non-homogeneous and these techniques could lose the information about small objects decreasing the resolution.

Deconvolution could be improved by taking into account more physical aspects – for example, the convolution kernels could be computed from analytical considerations or Monte Carlo simulation. In [31] scatter radiation assumed to be related with registered radiation by Gauss-like function composed using one of the analytical models with a few free parameters that are approximated through the X-ray image segmentation.

Further improvement of the deconvolution technique is called as “scattering kernels superposition”. The main idea here is to represent the scatter radiation S as linear combination of the primary radiation P and scattering kernels K (point spread functions).

$$S(x, y) = \iint P(\tilde{x}, \tilde{y}) \cdot K_{\tilde{x}, \tilde{y}}(x - \tilde{x}, y - \tilde{y}) d\tilde{x} d\tilde{y}$$

Scattering kernel $K_{\tilde{x}, \tilde{y}}(x - \tilde{x}, y - \tilde{y})$ for given image point $\tilde{x}, \tilde{y}$ is the scatter radiation registered by the detector while irradiating the object by a pencil beam at corresponding point:

$$P(\tilde{x}, \tilde{y}) = \delta(\tilde{x} - X, \tilde{y} - Y)$$

$$S(x, y) = K_{X, Y}(x - X, y - Y)$$

In case of homogeneous object, where each point of the image could be described by the same scattering kernel the linear combination is transformed into the convolution:

$$K_{\tilde{x}, \tilde{y}}(x - \tilde{x}, y - \tilde{y}) = K_0(x - \tilde{x}, y - \tilde{y})$$

$$S(x, y) = \{P * K_0\}(x, y)$$

In general case, studied object can be approximated by series of quasi-homogeneous regions i and scatter radiation is approximated as follow:

$$S(x, y) = \sum_i \{P_i * K_i\}(x, y)$$

Finally, the radiation registered by the detector M is a sum of the primary radiation and the scattered radiation:

$$M(x, y) = P(x, y) + \sum_i \{P_i * K_i\}(x, y)$$

Knowing the partitioning of the object into the quasi-homogeneous regions and corresponding scattering kernels the primary radiation can be recovered iteratively or by deconvolution [32].

Scattering kernels strongly depend on X-ray source spectrum, kind of matter distributed inside the object, its structure and geometrical parameters. etc. In [32] partitioning of the object into the quasi-homogeneous regions and scattering kernels construction has been proposed to be done by support vector machine from the results of the Monte Carlo simulation. Interactions of the X-rays with phantoms similar to the studied object are simulated with different observation parameters (angles, air-gap, spectrum etc.) and different object parameters (thickness, width etc.). Scattering kernels are obtained by simulation of the object irradiation at specific point by a pencil beam. Such image is the sum of primary and scattered radiation. Optionally obtained library of scattered radiation kernels may be shrunk (keep only most characteristic ones) through the clustering analysis. Support vector machine is trained to identify which scattering kernel from the library should be applied to a specific point of the X-ray image.

A convolutional neuronal network could be used for the purposes [33].

Compared to other methods that requires a Monte Carlo simulation scattering kernels superposition require the simulation to be performed once beforehand for construction of the library and to train the classifier. The scatter radiation compensation is faster in the second case, but at the cost of accuracy.

Conclusions

The problem of the scatter radiation influence on the X-ray images is still relevant, especially in medical context. To resolve this problem suppression techniques are used, such as anti-scatter grid with air-gapping. Suppression techniques greatly raise the image contrast suppressing significant part of the scattered radiation on the detector but in cost of radiation dose increasing. Modern medicine believes in “smaller the dose - healthier the patient” thesis (ALARA or As Low As Reasonable principle). Moreover, some X-ray apparatus configurations greatly complicate the use of suppression methods (especially in CT, where large air gaps and heavy collimators and anti-scatter grids are unwanted). In contrast to suppression techniques, scatter estimation\compensation techniques could help to lower the dose and to avoid the mentioned hardware incompatibility problems. Among all of the solutions, scattering kernels superposition enhanced by neural network and Monte Carlo based iterative procedure seems to be the most efficient methods – the first method works faster but in general is expected to be less accurate than second, but second method requires lots of computing resources and so is slower than first one.

Until present many methods are already have been proposed and validated but some promising ones are still being actively developed by commercial organizations and therefore they are the commercial secrets that actualizes further research in this field.

It may be concluded that now the most promising approaches for scatter compensation should include Monte-Carlo based simulation as while as modern data analysis techniques like neural networks. This combination provides the possibility to take into account as much known physical properties as possible and to predict the unknown physical properties like underline object structure influence of noise, etc.

Список використаних джерел

- [1] Monnin P. A comprehensive model for x-ray projection imaging system efficiency and image quality characterization in the presence of scattered radiation. / P. Monnin, F. Verdun, H. Bosmans, S. R. Perez, N. Marshall // *Physics in Medicine and Biology*. – 2017. – 62(14). – P. 5691–5722.
- [2] Александр М. Влияние рассеянного рентгеновского излучения на качество изображения и методы его подавления. / М. Александр, П. Николай // *Биотехносфера*. – 2012. –(3-4 (21-22)). – P. 10-14.

References

- [1] MONNIN, P. et al. (2017) A comprehensive model for x-ray projection imaging system efficiency and image quality characterization in the presence of scattered radiation. *Physics in Medicine and Biology*. 62(14). p.5691–5722. <https://doi.org/10.1088/1361-6560/aa75bc>
- [2] ALEKSANDR, M. & NIKOLAY, P. (2012) Vliyaniye rasseyannogo rentgenovskogo izlucheniya na kachestvo izobrazheniya i metody ego podavleniya. *Biotechnosfera*. (3-4 (21-22)). p.10-14.

- [3] Mizuta M. Comparison of anti-scatter grids for digital imaging with use of a direct-conversion flat-panel detector. / M. Mizuta, S. Sanada, H. Akazawa, T. Kasai, S. Abe, Y. Ikeno, S. Mitou // *Radiological physics and technology*. – 2012. – 5(1). – P. 46-52. <https://doi.org/10.1007/s12194-011-0134-1>
- [4] Robert G. Control of scattered radiation by air gap techniques: applications to chest radiography. / G. Robert, H. John // *American Journal of Roentgenology*. – 1974. – 121(1), - P. 109-118. <https://doi.org/10.2214/ajr.122.1.109>
- [5] Tsuji Y. Scatter radiation and the effects of air gaps in cephalometric radiography. / Y. Tsuji, K. Araki, A. Endo // *Oral Radiol.* – 2006. – 22(1). – P. 7. <https://doi.org/10.1007/s11282-006-0038-7>
- [6] Yu-Na Choi. Measurement and Evaluation of Scatter Fractions for Digital Radiography with a Beam-Stop Array. / Choi Yu-Na, Cho Hyo-Min, Kim Yi-Seul, An Su-Jung, Kim Hee-Joung // *Medical Physics*. – 2010. – 21(1). – P. 9-15.
- [7] Zhu L. Scatter correction for cone-beam CT in radiation therapy. / L. Zhu, Y. Xie, J. Wang, L. Xing // *Medical Physics*. – 2009. – 36(6). – P. 2258–2268. <https://doi.org/10.1118/1.3130047>
- [8] Niu T. Scatter correction for full-fan volumetric CT using a stationary beam blocker in a single full scan. / T. Niu, L. Zhu // *Medical Physics*. – 2011. – 38(11). – P. 6027–6038. <https://doi.org/10.1118/1.3651619>
- [9] Siewerdsen J. H. A simple, direct method for x-ray scatter estimation and correction in digital radiography and cone-beam CT. / J. H. Siewerdsen, M. J. Daly, B. Bakhtiar, D. J. Moseley, S. Richard, H. Keller, D. A. Jaffray // *Medical Physics*. – 2006. – 33(1). – P. 187-197. <https://doi.org/10.1118/1.2148916>
- [10] Boone J. M. An analytical model of the scattered radiation distribution in diagnostic radiology. / J. M. Boone, J. A. Seibert // *Med. Phys.* – 1988. – 15(5). – P. 721-725. <https://doi.org/10.1118/1.596186>
- [11] Honda M. Method for estimating the intensity of scattered radiation using a scatter generation model. / M. Honda, K. Kikuchi, K. Komatsu // *Med. Phys.* – 1991. – 18(2). – P. 219-226. <https://doi.org/10.1118/1.596710>
- [12] Yao W. An analytical approach to estimating the first order x-ray scatter in heterogeneous medium. / W. Yao, K. W. Leszczynski // *Med. Phys.* – 2009. – 36(7). – P. 3145-3156. <https://doi.org/10.1118/1.3152114>
- [13] Agostinelli S. Geant4—a simulation toolkit. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A*. – 2003. – 506(3). – P. 250–303. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8)
- [14] Jan S. GATE - Geant4 Application for Tomographic Emission: a simulation toolkit for PET and SPECT. / S. Jan, G. Santin, D. Strul, S. Staelens, K. Assié, D. Autret, ... C. Morel // *Physics in Medicine and Biology*. – 2004. – 49(19). – P. 4543–4561. <https://doi.org/10.1088/0031-9155/49/19/007>
- [15] Bielajew AF. History, overview and recent improvements of EGS4. / AF. Bielajew, H. Hirayama, WR. Nelson, DWO. Rogers // *United States*. – 1998. <https://doi.org/10.2172/839781>
- [16] Kawrakow, I. Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. I. EGSnrc, the new EGS4 version. / I. Kawrakow // *Med. Phys.* – 2000. – 27(3). – P. 485-498. <https://doi.org/10.1118/1.598917>
- [3] MIZUTA, M. et al. (2012) Comparison of anti-scatter grids for digital imaging with use of a direct-conversion flat-panel detector. *Radiological physics and technology*. 5(1). p.46-52. <https://doi.org/10.1007/s12194-011-0134-1>
- [4] ROBERT, G. & JOHN, H. (1974) Control of scattered radiation by air gap techniques: applications to chest radiography. *American Journal of Roentgenology*. 121(1). p.109-118. <https://doi.org/10.2214/ajr.122.1.109>
- [5] TSUJI, Y., ARAKI, K. & ENDO, A. (2006) Scatter radiation and the effects of air gaps in cephalometric radiography. *Oral Radiol.* 22(1). p.7. <https://doi.org/10.1007/s11282-006-0038-7>
- [6] YU-NA CHOI. et al. (2010) Measurement and Evaluation of Scatter Fractions for Digital Radiography with a Beam-Stop Array. *Medical Physics*. 21(1). p.9-15.
- [7] ZHU, L. et al. (2009) Scatter correction for cone-beam CT in radiation therapy. *Medical Physics*. 36(6). p.2258–2268. <https://doi.org/10.1118/1.3130047>
- [8] NIU, T. & ZHU, L. (2011) Scatter correction for full-fan volumetric CT using a stationary beam blocker in a single full scan. *Medical Physics*. 38(11). p.6027–6038. <https://doi.org/10.1118/1.3651619>
- [9] SIEWERDSEN, J. H. et al. (2006) A simple, direct method for x-ray scatter estimation and correction in digital radiography and cone-beam CT. *Medical Physics*. 33(1). p.187-197. <https://doi.org/10.1118/1.2148916>
- [10] BOONE, J. M. & SEIBERT, J. A. (1988) An analytical model of the scattered radiation distribution in diagnostic radiology. *Medical Physics*. 15(5). p.721-725. <https://doi.org/10.1118/1.596186>
- [11] HONDA, M. , KIKUCHI, K. & KOMATSU, K. (1991) Method for estimating the intensity of scattered radiation using a scatter generation model. *Medical Physics*. 18(2). p.219-226. <https://doi.org/10.1118/1.596710>
- [12] YAO, W. & LESZCZYNSKI, K. W. (2009) An analytical approach to estimating the first order x-ray scatter in heterogeneous medium. *Medical Physics*. 36(7). p.3145-3156. <https://doi.org/10.1118/1.3152114>
- [13] AGOSTINELLI, S. et al. (2003). Geant4—a simulation toolkit. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A*. 506(3). p.250–303. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8)
- [14] JAN, S. et al. (2004) GATE - Geant4 Application for Tomographic Emission: a simulation toolkit for PET and SPECT. *Physics in Medicine and Biology*. 49(19). p.4543–4561. <https://doi.org/10.1088/0031-9155/49/19/007>
- [15] BIELAJEW, AF. et al. (1998) History, overview and recent improvements of EGS4. *United States*. <https://doi.org/10.2172/839781>
- [16] KAWRAKOW, I. (2000) Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. I. EGSnrc, the new EGS4 version. *Med. Phys.* 27(3). p.485-498. <https://doi.org/10.1118/1.598917>

- [17] Halbleib J. ITS: the Integrated TIGER Series of coupled electron/photon Monte Carlo transport codes. / J. Halbleib, T. Mehlhorn // Nucl. Sci. Eng. – 1984. – 92(2). – P. 338-339.
- [18] Goorley J. T. Initial MCNP6 Release Overview - MCNP6 version 1.0. / J. T. Goorley // United States. – 2013.
<https://doi.org/10.2172/1086758>
- [19] Salvat F. PENELOPE, a code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport. / F. Salvat, J. M. Fernandez-Varea, J. Sempau // OECD-Nuclear Energy Agency. – 2003.
- [20] Friedland W. Stochastic Simulation of DNA Double-Strand Break Repair by Non-homologous End Joining Based on Track Structure Calculations. / W. Friedland, P. Jacob, P. Kunderát // Radiation Research. – 2010. – 173(5). – P. 677-688.
<https://doi.org/10.1667/RR1965.1>
- [21] Friedland W. Stochastic modelling of DSB repair after photon and ion irradiation. International. / W. Friedland, P. Jacob, P. Kunderát // Journal of Radiation Biology. – 2012. – 88(1-2). – P. 129-136.
<https://doi.org/10.3109/09553002.2011.611404>
- [22] Martina F. LEPTS – a Radiation-Matter Interaction Model at the Molecular Level and its Use in Biomedical Applications. / F. Martina // Anthony Laskovski (Eds.), Biomedical Engineering, Trends in Electronics, Communications and Software. – 2011. – P. 277-294.
<https://doi.org/10.5772/13061>
- [23] Arce P. Integration of the low-energy particle track simulation code in Geant4. / P. Arce, A. Muñoz, M. Moraleda // Eur. Phys. J. D. – 2015. – 69(8). – P. 188.
<https://doi.org/10.1140/epjd/e2015-60138-0>
- [24] Champion C. EPOTRAN: A full-differential Monte Carlo code for electron and positron transport in liquid and gaseous water. / C. Champion, C. Le Loirec, B. Stosic // International Journal of Radiation Biology. – 2012. – 88(1-2). – P. 54-61.
<https://doi.org/10.3109/09553002.2011.641451>
- [25] Antonio M. Monte Carlo Methods to Model Radiation Interactions and Induced Damage. / M. Antonio // In: García Gómez-Tejedor G., Fuss M. (eds) Radiation Damage in Biomolecular Systems. Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering. Springer, Dordrecht. – 2012. – P. 203-225.
https://doi.org/10.1007/978-94-007-2564-5_13
- [26] Chen Y. WE-E-L100J-03: Scatter Measurements and Simulations in X-Ray Cone Beam CT Breast Imaging. / Y. Chen, Bob Liu, J. O'Connor, C. Didier, Stephen Glick // Medical Physics. – 2007. – 34(6). – P. 2606.
<https://doi.org/10.1118/1.2761578>
- [27] Yuan Xu. A practical cone-beam CT scatter correction method with optimized Monte Carlo simulations for image-guided radiation therapy. / Xu. Yuan // Physics in Medicine & Biology. – 2015. – 60(9). – P. 3567-3587.
<http://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/60/9/3567>
- [28] Watson P. G. F. Implementation of an efficient Monte Carlo calculation for CBCT scatter correction: phantom study. / P. G. F. Watson, E. Mainegra-Hing, N. Tomic, J. Seuntjens // Journal of Applied Clinical Medical Physics. – 2015. – 16(4). – P. 216-227.
<http://doi.org/10.1120/jacmp.v16i4.5393>
- [17] HALBLEIB, J. & MEHLHORN, T. (1984) ITS: the Integrated TIGER Series of coupled electron/photon Monte Carlo transport codes. Nucl. Sci. Eng. 92(2). p.338-339.
<https://doi.org/10.13182/NSE86-A18182>
- [18] GOORLEY, JOHN T. et al. (2013). Initial MCNP6 Release Overview - MCNP6 version 1.0. United States.
<https://doi.org/10.2172/1086758>
- [19] SALVAT, F., FERNANDEZ-VAREA, J.M. & SEMP AU, J. (2003) PENELOPE, a code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport. OECD-Nuclear Energy Agency.
- [20] FRIEDLAND, W., JACOB, P. & KUNDRÁT, P. (2010) Stochastic Simulation of DNA Double-Strand Break Repair by Non-homologous End Joining Based on Track Structure Calculations. Radiation Research. p.677-688.
<https://doi.org/10.1667/RR1965.1>
- [21] FRIEDLAND, W., JACOB, P. & KUNDRÁT, P. (2012) Stochastic modelling of DSB repair after photon and ion irradiation. International Journal of Radiation Biology. 88(1-2). p.129-136.
<https://doi.org/10.3109/09553002.2011.611404>
- [22] MARTINA, F. et al. (2011) LEPTS – a Radiation-Matter Interaction Model at the Molecular Level and its Use in Biomedical Applications. Anthony Laskovski (Eds.), Biomedical Engineering, Trends in Electronics, Communications and Software. p.277-294.
<https://doi.org/10.5772/13061>
- [23] ARCE, P. et al. (2015) Integration of the low-energy particle track simulation code in Geant4. Eur. Phys. J. D. 69(8). p.188.
<https://doi.org/10.1140/epjd/e2015-60138-0>
- [24] CHAMPION, C., LE LOIREC, C. & STOSIC, B. (2012) EPOTRAN: A full-differential Monte Carlo code for electron and positron transport in liquid and gaseous water. International Journal of Radiation Biology. 88(1-2). p.54-61.
<https://doi.org/10.3109/09553002.2011.641451>
- [25] ANTONIO, M. et al. (2012) Monte Carlo Methods to Model Radiation Interactions and Induced Damage. In: García Gómez-Tejedor G., Fuss M. (eds) Radiation Damage in Biomolecular Systems. Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering. Springer, Dordrecht. p.203-225.
https://doi.org/10.1007/978-94-007-2564-5_13
- [26] CHEN, Y. et al. (2007) WE-E-L100J-03: Scatter Measurements and Simulations in X-Ray Cone Beam CT Breast Imaging. Medical Physics. 34(6). p.2606.
<https://doi.org/10.1118/1.2761578>
- [27] YUAN, XU. et al. (2015) A practical cone-beam CT scatter correction method with optimized Monte Carlo simulations for image-guided radiation therapy. Physics in Medicine & Biology. 60(9). p.3567-3587.
<http://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/60/9/3567>
- [28] WATSON, P. G. F. et al. (2015) Implementation of an efficient Monte Carlo calculation for CBCT scatter correction: phantom study. Journal of Applied Clinical Medical Physics. 16(4). p.216-227.
<http://doi.org/10.1120/jacmp.v16i4.5393>

- [29] Kim K. Fully iterative scatter corrected digital breast tomosynthesis using GPU-based fast Monte Carlo simulation and composition ratio update. / K. Kim, T. Lee, Y. Seong, J. Lee, K. E. Jang, J. Choi, Y. W. Choi, H. H. Kim, H. J. Shin, J. H. Cha, S. Cho, J. C. Ye // *Med. Phys.* – 2015. – 42(9). – P. 5342-5355. <https://doi.org/10.1118/1.4928139>
- [30] Jassam K. REMOVAL OF RANDOM NOISE FROM CONVENTIONAL DIGITAL X-RAY IMAGES. / K. Jassam // *Int. Soc. Photogrammetry Remote Sens.* – 1992. – 29. – P. 113-118.
- [31] Wei Z. A patient-specific scatter artifacts correction method. / Z. Wei, B. Stephen, N. Kai, S. Sebastian, R. Kevin, C. Guang-Hong // *Proc. SPIE 9033, Medical Imaging 2014: Physics of Medical Imaging*. – 2014. – 9033. – P. 10-17.
- [32] Danyk A.Y. Optimization of grid-less scattering compensation in X-ray imaging: Simulation study. / A.Y. Danyk, S. Radchenko, O.O. Sudakov // *2017 IEEE 37th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)*. – 2017. – P. 316-320.
- [29] KIM, K. et al. (2015) Fully iterative scatter corrected digital breast tomosynthesis using GPU-based fast Monte Carlo simulation and composition ratio update. *Med. Phys.* 42(9). p. 5342-5355. <https://doi.org/10.1118/1.4928139>
- [30] JASSAM, K. (1992) REMOVAL OF RANDOM NOISE FROM CONVENTIONAL DIGITAL X-RAY IMAGES. *Int. Soc. Photogrammetry Remote Sens.* 29. p.113-118.
- [31] WEI, Z. et al. (2014) A patient-specific scatter artifacts correction method. In *Proc. SPIE 9033, Medical Imaging 2014: Physics of Medical Imaging*. San Diego, California, United States, 19 March 2014. SPIE 9033: pp. 10-17 <https://doi.org/10.1117/12.2043923>
- [32] DANYK, A.Y., RADCHENKO, S. & SUDAKOV, O.O. (2017) Optimization of grid-less scattering compensation in X-ray imaging: Simulation study. In *2017 IEEE 37th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)*. Kiev, Ukraine, 18-20 April 2017. IEEE: pp.316-320. <https://doi.org/10.1109/ELNANO.2017.7939770>
- [33] JOSCHA, M. et al. (2018) Deep scatter estimation (DSE): feasibility of using a deep convolutional neural network for real-time x-ray scatter prediction in cone-beam CT. In *Proc. SPIE 10573, Medical Imaging 2018: Physics of Medical Imaging*. Houston, Texas, United States, 9 March 2018. SPIE 10573: pp.1-6 <https://doi.org/10.1117/12.2292919>

Надійшла до редколегії 20.11.2018

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 532.511 : 532.59 : 612.12-008.331 : 612.15:615.849

Б.В. Бацак¹, асп.,
Ю.Ф. Забашта², д.ф.-м.н., проф.,
О.С. Свечнікова³, к.ф.-м.н., с.н.с.

B.V. Batsak¹, Ph stud.,
Yu.F. Zabashta², Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof.,
O.S. Svechnikova, PhD, Sen. Sci. Res.

Відбиті хвилі та кровоток у судинах

Reflected waves and blood flow in vessels

^{1,2,3}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: ¹dr.batsak@gmail.com,
²zabashta@univ.kiev.ua,
³oksana.svechnikova@gmail.com.

^{1,2,3}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: ¹dr.batsak@gmail.com,
²zabashta@univ.kiev.ua,
³oksana.svechnikova@gmail.com.

За допомогою MPT - методу вивчається поведінка пульсової хвилі в аорті. Встановлено, що швидкість кровотоку пропорційна зміні площі поперечного перерізу судини. Показано, що цей факт є свідченням відсутності впливу відбитих хвиль на форму пульсової хвилі.

Ключові слова: пульсова хвиля, MPT – метод, відбиті хвилі.

Currently, the majority of hemodynamic parameters, such as blood flow velocity, pulse wave velocity, blood pressure parameters, and the biomechanical properties of the arterial wall, are studied in detail both in normal conditions and in pathology. However, in real hemodynamics (in vivo) there is a combination of these factors. The problem of their interaction of a pulse wave with obstacles (stenosis, bifurcation, and so on) remains poorly understood. The aim of our work was to study the behavior of the pulse wave in the aorta as an integral indicator of the interaction of the main parameters of hemodynamics using the MRI method. The method of studying the behavior of the pulse wave in the aorta is based on the hydrodynamic theory of blood movement in the vessels. Using this theory, a formula was obtained that relates the change in the cross-sectional area of a vessel during pulse wave propagation and blood flow velocity. Experimental determination of blood flow parameters and the state of the vascular wall of the thoracic aorta was carried out using magnetic resonance imaging. Computer processing of phase-contrast images was carried out using the Q Flow software package and the dependences of the blood flow velocity and the cross-sectional area of the vessels on time were obtained. As a result, it was found that the blood flow velocity is proportional to the change in the cross-sectional area of the vessel. It is shown that this fact indicates the absence of the influence of the reflected waves on the pulse wave shape.

Key Words: pulse wave, MRI - method, reflected waves.

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Як відомо (напр. [1, 2, 3] та ін.), кров у судинній системі переноситься пульсовою хвилею. Поширюючись у судинах, ця хвиля натрапляє на перешкоди, до яких відносяться стенози – різкі зміни форми та розміру поперечного перерізу судини, біфуркації – розгалуження судин тощо.

Перешкоди є джерелом появи відбитих хвиль. Загальноприйнятою (напр., [2, 1, 3] та ін.) є теза про суттєвий вплив відбитих хвиль на процеси кровотоку в судинах.

Метою даної статті є експериментальна перевірка згаданої тези.

Залежність між швидкістю кровотоку та площею поперечного перерізу судини

Для того, щоб відповісти на запитання, який експеримент слід виконати у даному випадку, розглянемо задачу про поширення пульсової хвилі у судині нескінченної довжини.

Вважатимемо, що судина має форму циліндра. Введемо циліндричні координати віссю z , що збігається з віссю циліндра, радіальну координату позначимо через r .

Розглядатимемо кров як ідеальну нестисливу рідину. Відповідно рівняння руху є рівняння Ейлера (див. на пр. [4] та ін.)

$$\rho \frac{\partial v_z}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial z}, \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial v_r}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial r}, \quad (2)$$

де ρ - густина, t - час, p - тиск, v_z та v_r - осьова та радіальна компоненти швидкості, відповідно.

Умова нестисливості має вигляд (див., напр. [4] та ін.)

$$\frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r v_r)}{\partial r} = 0 \quad (3)$$

Діаметр судини суттєво менший за довжину хвилі. Це дозволяє скористатись теорією довгих ліній (див. напр. [5] та ін.), згідно з якою розв'язок рівняння (1) має вигляд

$$v_z = v_z \left(t - \frac{z}{c} \right), \quad (4)$$

де c - швидкість поширення хвилі

Підставляючи рівність (4) в умову (3) та інтегруючи по r , отримуємо формулу

$$v_r = \frac{r}{2c} \frac{\partial v_z}{\partial t} \quad (5)$$

Позначимо через u_r радіальне зміщення. За визначенням

$$v_r = \frac{\partial u_r}{\partial t} \quad (6)$$

Підставляючи рівність (6) у формулу (5) та інтегруючи по t , маємо

$$u_r = \frac{r}{2c} v_z \quad (7)$$

Позначимо через b внутрішній радіус судини, а через u_b радіальне зміщення стінки судини. Згідно з формулою (7) запишемо

$$u_b = \frac{b}{2c} v_z \quad (8)$$

Позначимо через ΔS зміну площі поперечного перерізу судини при поширенні пульсової хвилі. Ця зміна визначається очевидною формулою

$$\Delta S = 2\pi b u_b \quad (9)$$

Підставляючи u_b з формули (9) в (8), маємо

$$\frac{v_z}{\Delta S} = \frac{c}{\pi b^2} \quad (10)$$

Згідно з рівністю (10) при поширенні пульсової хвилі в судинні нескінченної довжини відношення $v_z/\Delta S$ мусить залишатися сталим. У такій ситуації відбиті хвилі відсутні: існує тільки одна – первина хвиля. То ж рівність (10) слід розглядати як умову, за якої відбиті хвилі відсутні. Ця умова підказує ідею експерименту, який слід поставити, щоб перевірити, чи впливають відбиті хвилі на кровоток у реальній судині, яка має нескінченну довжину.

За цією умовою необхідно для вибраної судини одночасно вимірювати залежність v_z та ΔS від часу. Якщо виявиться, що протягом часу вимірювань відношення $v_z/\Delta S$ залишається сталим, то це означатиме, що відбиті хвилі практично не впливають на кровоток у даній судині: сталість відношення $v_z/\Delta S$ свідчить про те, що кровоток фактично являє собою тільки первинну хвилю.



Рис. 1. Зображення аорти, отримане за допомогою SSFP послідовності на МР-томографі. Білою лінією позначено площу сканування фазово-контрастної послідовності.

Експериментальні результати

Виміри були проведені на грудній аорті за допомогою магніторезонансного томографа (МРТ) Toshiba Vantage Titan 1.5T. На рис. 1 наведене МРТ - зображення грудної аорти пацієнта, яке дозволяє визначити вісь аорти та спланувати наступне фазово-контрастне дослідження (див. рис. 2), за допомогою якого визначається швидкість та об'єм кровотоку в досліджуваній площині.

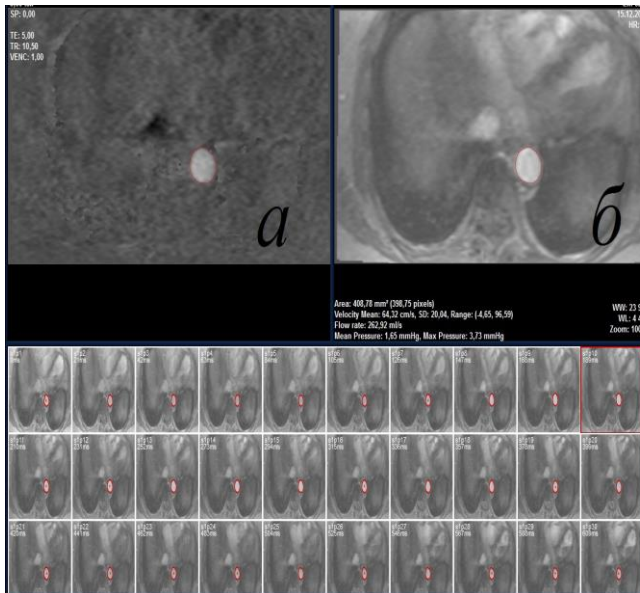


Рис. 2. Постпроцесінг фазово-контрастних зображень: зображення поперечного перерізу грудної аорти (*а* - фазово контрастне зображення; *б* - анатомічна реконструкція).

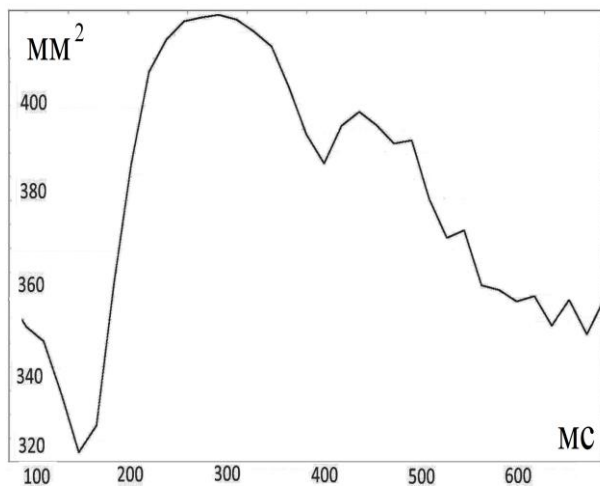


Рис. 3. Залежність площі поперечного перерізу ΔS аорти на рівні діафрагми від часу.

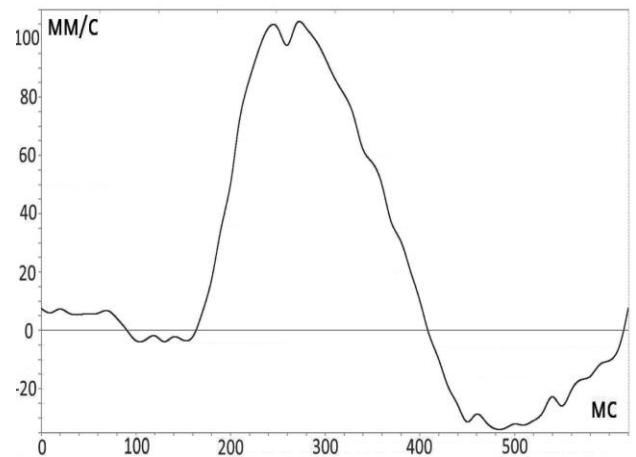


Рис. 4. Залежність швидкості V_z від часу для аорти на рівні діафрагми.

При проведенні комп'ютерної обробки во-контрастних зображення (напр. [6]) у рамному пакеті Q Flow отримані залежності $i \Delta S$ від часу, які наведені на рис. 3 та 4, відповідно. Залежність відношення $v_z/\Delta S$ асу представлена на рис. 5.

Як видно з рис. 5, у межах похибки

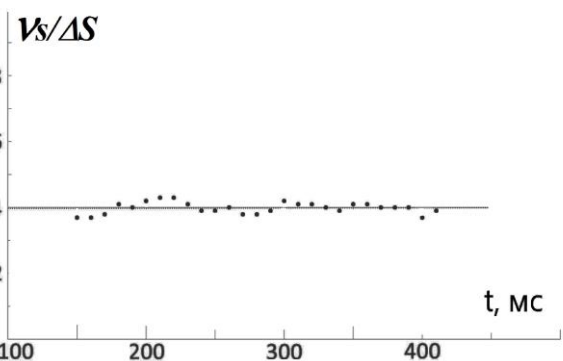


Рис. 5. Залежність відношення $v_z/\Delta S$ від часу для аорти.

експерименту відношення $v_z/\Delta S$ можна вважати сталим.

Висновки

Пульсова хвиля при своєму поширенні в судині, взаємодіючи із перешкодами, утворює відбиті хвилі. Із проведеного експерименту випливає, що характеристики пульсової хвилі співпадають із характеристиками хвилі в судині нескінченної довжини. Цей факт означає, що відбиті хвилі практично не впливають на форму пульсової хвилі, і свідчить про інтенсивне згасання відбитої хвилі.

Список використаних джерел

1. Шмидт Р. Физиология человека: В 3-х томах. Т. 1: 3-е изд. / Шмидт Р., Тевс Г - М.: Мир, - 2005. - 323 с.
2. Физиология человека / Под ред. Покровского В.М., Коротько Г.Ф.: 2-е изд., перераб. и доп. - М.: Наука, 2003. - 656с.
3. Caro C.G. The mechanics of the circulation. / Caro C.G., Pedley T.J., Schroter R.S., Seed W.A. - Oxford University Press, New York - Toronto, 1978. - 624 p.
4. Ландау Л.Д. Теория упругости /Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. - 4-е изд., испр. и доп. -М.: Наука., 1987. - 248 с.
5. Исакович М.А. Общая акустика. - М.:Наука, 1973. – 495 с.
6. Бацак Б.В. Визначення швидкості пульсової хвилі за даними МРТ /Бацак Б.В., Забашта Ю.Ф., Сенчуров С.П., Трембовецька О.М. / Зб.тез IV-ї міжнародної конференції «Медична фізика – сучасний стан, проблеми, шляхи розвитку. Новітні технології», 23-24 жовтня 2014 р., Київ: КНУ імені Тараса Шевченка, 2014. – С. 5.

References

1. SCHMIDT, R. and TEVS, G. (2005). *Human Physiology*: In 3 volumes. T. 1: 3rd ed. Moskva: Mir.
2. POKROVSKY, V.M. and KOROT'KO, G.F. (ed.) (2003) *Human Physiology*. Moskva: Nauka.
3. CARO, C.G., et al (1978) *The mechanics of the circulation*. New York – Toronto: Oxford University Press.
4. LANDAU, L.D. and LIFSHITS, E.M. (1987) *Elasticity theory*. Moskva: Nauka
5. ISAKOVICH M.A. (1973) *General acoustics*. Moskva: Nauka.
6. BATSAK, B.V. et al. (2014) *Determination of pulse wave velocity according to MRI data*. In IV International Conference “*Medical physics – the current status, problems, the way of development. Innovation technologies*” Kyiv, 23-24 October 2014. Kyiv: Taras Shevchenko National University of Kyiv. p. 5.

Надійшла до редколегії 10.03.18

УДК 538.9: 536.423.16: 544.777

Вербінська Г.М., к.ф.-м.н., доц.
Вергун Л.Ю., к.ф.-м.н., н.с.,
Британ А.В., к.ф.-м.н., м.н.с.

**Експериментальна методика для
дослідження кінетики формування
гідрогелю желатину**

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: verlen73@ukr.net

G.M.Verbinska, PhD, Doc.,
L.Yu.Vergun, PhD, Sci. Res.,
A.V.Brytan, PhD, Sci. Res.

**Experimental method for studying the kinetics
of formation of gelatin hydrogel**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: verlen73@ukr.net

Досліджується молекулярний механізм утворення гідрогелю желатину. Даний процес містить декілька стадій: об'єднання ланцюгів в потрібну спіраль, утворення структури «зшитих» мікрогелів, утворення просторової сітки. Запропоновано експериментальну методику, в основі якої полягає вивчення процесів випаровування крапель рідини. Основною величиною, що визначається із експерименту, є часовий інтервал утворення структури «зшитих» мікрогелів. Проведено апробацію методики для 5 % водного розчину желатину.

Ключові слова: випаровування, гелеутворення, желатин

The molecular mechanism of formation of gelatin hydrogel is studied. Gelatin is a product of thermal denaturation or of physical and chemical dehydration of collagen, which is accompanied by a breaking of triple collagen structures and the formation of a system of coils. The formation of a gelatin hydrogel is a conformational transformation of a system of dissolved coils into a spatial network. This process contains several stages, namely, the combining of chains into a triple spiral, the formation of the structure of "stitched" microgels, the formation of a spatial network. To establish the molecular mechanisms that accompany the formation of the structure of gelatin hydrogel, a method is proposed. This method is based on the study of the evaporation processes of liquid drops. The experiment is conducted by studying the size of the drop on the pendant at certain intervals. The droplet is located in a airtight chamber, which is equipped with a modified optical system. The main value, determined from the experiment, is the time interval of the formation of the structure of "stitched" microgels. Approbation of the method for 5% aqueous solution of gelatin was carried out. Experimentally established the initial time of forming the network. This value is 8 minutes. The duration of the stage of existence of the structure of "stitched" microgels, which was 3 minutes, was determined. It is suggested to use this method for developing the methods of stability of gels from drying.

Key Words: evaporation, gelation, gelatin

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Як відомо[1] дослідженню кінетики формування гелів, що містять желатин, приділяється багато уваги. Насамперед, це пов'язано з використанням желатинових гелів у харчовій, легкій та фармацевтичній промисловостях, а також з удосконаленням у цих галузях існуючих технологічних процесів. Крім того гідрогелі желатину

використовуються у дослідженнях щодо інженерії м'яких тканин та клітин [2,3]. Желатин є продуктом термічної денатурації або фізичної та хімічної дегідратації колагену, що супроводжується розривом потрібної колагенової структур і утворенням системи клубків.

Утворення гідрогелю являє собою конформаційне перетворення системи розрізаних клубків в просторову сітку. [1]. На

основі літературних даних [див., наприклад 4] процес утворення гідрогелю желатину поділяють на три стадії. Перша стадія відбувається при охолодженні до 40°C. На цій стадії відбувається об'єднання ланцюгів в потрібну спіраль внаслідок конфірмаційного переходу «клубок-спіраль». На другій стадії відбувається утворення структури так названих «зшитих» мікрогелів. На третій стадії – завершальній утворюється просторова сітка. Для характеристики першої стадії використовуються, як наведено в літературі (див., наприклад [4]) експериментальні методи, на основі поляриметричних досліджень. Одним із параметрів, що можуть характеризувати другу стадію був визначений параметр P_{gel} - частка макромолекул, що формують сітку желатинового гідрогелю. Відповідно до роботи [2] він може бути визначений за формулою

$$P_{gel}(t) = P_{gel}^{\infty} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right), \quad (1)$$

де t - час, P_{gel}^{∞} - гранична величина $P_{gel}(t)$ при $t \rightarrow \infty$, τ - тривалість другої стадії. Як правило, ця величина пов'язана із концентрацією розчину, будовою макромолекули і т.д. В даній статті ми пропонуємо експериментальну методику для визначення проміжку параметру τ - часового інтервалу утворення структури «зшитих» мікрогелів.

Експериментальна методика

Для визначення часового інтервалу τ утворення структури «зшитих» мікрогелів була використана методика, що пов'язана із дослідженням кінетики випаровування краплин. Слід зазначити, що питання про визначення часових інтервалів, впродовж яких відбуваються конформаційні переходи в біополімерних структурах також розглядається і в інших роботах [див. наприклад 5,6]

Головна ідея застосування цього методу полягає в тому, що гель розглядається як пористий матеріал, що містить каркас сітки та молекули рідини (води), які знаходяться в рівновазі з каркасом [3]. При такій умові випаровування відбуватись не буде.

Пропонований експериментальний метод [7,] заснований на вивченні процесів, що протікають у системі, яка представляє собою краплю, що випаровується. Як відомо (див, наприклад [8]), процес випаровування протікає внаслідок того, що з поверхні рідинних систем вилітає частина молекул, утворюючи над рідиною пар. Для виходу з такої системи молекули, що випаровуються повинні володіти достатньою енергією, щоб подолати сили тяжіння з боку молекул, що залишились. Ці сили визначаються складом рідинної системи. Розглянемо два типи рідинних систем. Перша буде складатися з частинок одного сорту «О». Друга буде представляти собою розчин, що складається з молекул розчинника «О» і розчиненого речовини «Р». Тоді в першому випадку взаємодія між частинками буде визначатися взаємодією «О-О», а в другому взаємодією «О-О», «О-Р» і «Р-Р». Таким чином в рідинних системах, у тому числі і в системі «вода – желатин», процес випаровування буде визначатися не тільки взаємодією молекул розчинника між собою, але також як взаємодією «молекула розчинника-молекула розчиненої речовини», так і взаємодіями тільки між молекулами розчиненої речовини. Взаємодія молекул желатину між собою і спонукає утворення каркасу сітки.

Для дослідження кінетики формування гелю методом краплі, що випаровується, використовувалася експериментальна установка, схема якої наведена на рис. 1.

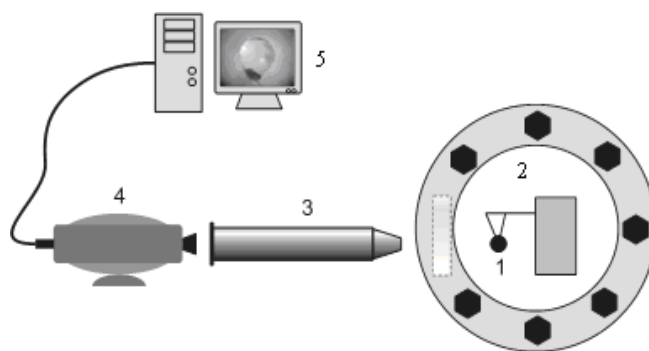


Рис. 1. Схема експериментальної установки для вимірювання швидкості випаровування крапель рідин [7].

Краплина водного розчину желатину з концентрацією 5% підвішується на підвісі (1) що розташований у герметичній камері (2). Це дозволяє контролювати склад газового середовища, в якому відбувається випаровування, його тиск та температуру. За допомогою веб-камери (3), обладнаної модифікованою оптичною системою (4) через фіксовані інтервали часу (30 с) отримуються фотографії краплини. Подальша обробка отриманих зображень здійснюється за допомогою програми Matlab з використанням комп'ютера (5). На основі одержаних даних розраховується площа краплини в певний момент часу. На рис.2 зображено зовнішній вигляд установки для дослідження випаровування крапель рідини. На рис.3 зображено краплю на підвісі в процесі проведення експерименту.

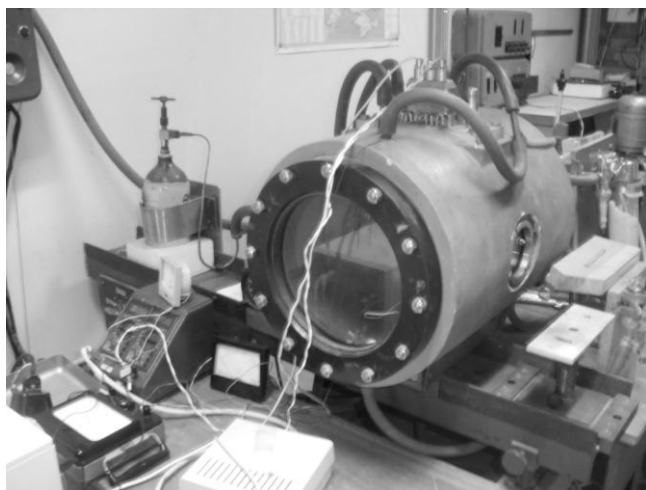


Рис. 2. Зовнішній вигляд установки для дослідження випаровування крапель рідини.



Рис. 3. Зображення краплі на підвісі в процесі проведення експерименту.

Результати експерименту та їх обговорення

В результаті експерименту було отримані часові залежності зміни діаметру краплини. Був введений безрозмірний коефіцієнт ξ , що характеризував відношення діаметру краплі d_t в будь-який момент часу до діаметру краплі в початковий момент часу d_0 . На рис.2 наведено часову залежність параметру ξ в процесі формування желатинового гідрогелю. Як було зазначено у вступі у відповідності з моделлю про сітчасту систему потрійних ланцюгів, що перебуває в рівновазі з розташованими в ній молекулами води [3] нас буде цікавити часовий інтервал, в якому випаровування відбуватись не буде. Саме цей часовий інтервал, на нашу думку, буде відповідати другій стадії формування гідрогелю – стадії утворення структури «зшитих» мікрогелів. Слід зазначити, що реєстрація розмірів краплини відповідала 5 хвилині з моменту приготування розчину желатини.

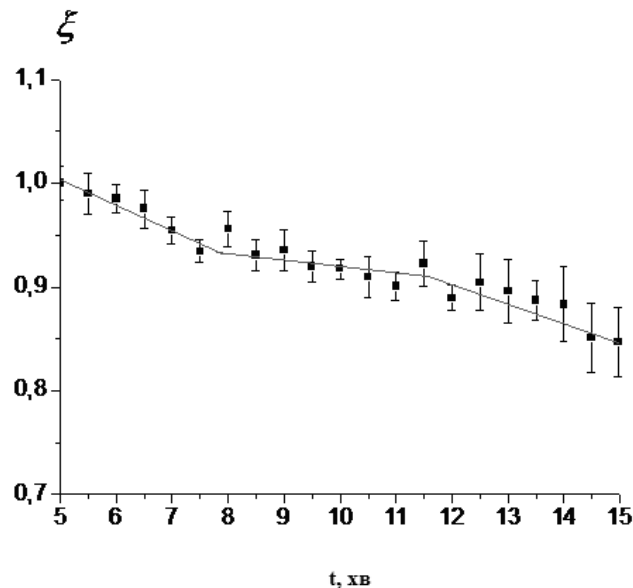


Рис. 2. Часова залежність коефіцієнта ξ .

З рис.2 видно, що в часовому інтервалі 8- 11 хвилин (враховуючи похибки) змін у розмірах краплі практично не відбувається. Саме в цьому інтервалі часу відбувається зшивка окремих структур мікрогелів та перерозподіл молекул води між ланцюгами

желатину. Починаючи з 11 хвилини, відбувається випаровування молекул розчинника з поверхні краплі та початок наростання твердої зневодненої фази (висихання гелю).

Висновки

В статті запропоновано експериментальну методику для визначення часового інтервалу другої стадії формування гідрогелю желатину.

Зазначена методика апробована для 5 % водного розчину желатину. Початковий момент формування сітки відповідав 8 хвилинам з моменту приготування розчину. Тривалість другої стадії склала 3 хвилини. Пропоновану методику можна, на наш погляд, використовувати при розробці методів стійкості гелів від висихання.

Список використаних джерел

1. Bigi A. Relationship between triple-helix content and mechanical properties of gelatin films/ A. Bigi, K. Panzavolta, K. Rubini // *Biomaterials*.-2004.- 25.-P. 5675–5680.
2. Forte A.E. Modelling and experimental characterisation of the rate dependent fracture properties of gelatine gels/ A.E. Forte, F.D'Amico, M.N. Charalambides et al.// *Food Hydrocolloids*.-2015.- 46.-P.180-190.
3. Zabashta Yu.F. Method for the Study of Properties of Collagen-Type Peptides Used in Modern Medical Technology/ Yu.F.Zabashta, V.E.Orel, L.Yu.Vergun, *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series: Physics & Mathematics*.-2014.-3.-P. 255-258.
4. Izmailova V. Gelation-Containing Multicomponent Blends/V.Izmailova, M.Derkach, M.Sakvarelidze// *Polymer Science, Ser.C*.-2004.-46(1).-P.73-92.
5. Herna'ndez Cifre J. G. Kinetic aspects of the coil-stretch transition of polymer chains in dilute solution under extensional flow / J. G. Herna'ndez Cifre, J. Garcí'a de la Torre//*Journal of Chemical Physics*.-2001.-115(20).-P.9578-9584.
6. Collin M. The folding mechanism of collagen-like model peptides explored through detailed molecular simulations/M.Collin// *Protein Science*.- 2006.-15.-P.2166–2177.
7. Verbinska G. Water and nitrobenzene droplets evaporation under ultraviolet irradiation / G.Verbinska, A.Brytan, T. Cleshchonok// *Physics of aerodisperse systems*.-2010.-47.-P.49-58.
8. Fuks N.A. *Evaporation and droplet growth in gaseous media* / N.A.Fuks.- . Pergamon Press , 1959.-72p.

References

1. BIGI, A., PANZAVOLTA, K. & RUBINI, K. (2004) Relationship between triple-helix content and mechanical properties of gelatin films. *Biomaterials*. 25. p.5675-5680.
2. FORTE, A.E., D'AMICO, F., CHARALAMBIDES, M.N. (2015) Modelling and experimental characterisation of the rate dependent fracture properties of gelatine gels. *Food Hydrocolloids*. 46. p.180-190.
3. ZABASHTA, Yu., OREL, V., VERGUN L. (2014) Method for the Study of Properties of Collagen-Type Peptides Used in Modern Medical Technology. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series: Physics & Mathematics*. 3. p.255-258.
4. IZMAILOVA, V., DERKACH, M., SAKVARELIDZE, M. (2004) Gelation-Containing Multicomponent Blends. *Polymer Science, Ser.C*. 46(1). p.73-92.
5. HERNANDEZ CIFRE, J. G., GARCIA DE LA TORRE, J. (2001) Kinetic aspects of the coil-stretch transition of polymer chains in dilute solution under extensional flow. *Journal of Chemical Physics*. 115(20).p.9578-9584.
6. COLLIN, M. (2006) The folding mechanism of collagen-like model peptides explored through detailed molecular simulations. *Protein Science*. 15.p.2166-2177.
7. VERBINSKA, G., BRYTAN, A., CLESHCHONOK, T. (2010) Water and nitrobenzene droplets evaporation under ultraviolet irradiation. *Physics of aerodisperse systems*. 47.p.49-58.
8. FUKS, N. A. (1959) *Evaporation and droplet growth in gaseous media*. Pergamon Press.

Надійшла до редколегії 16.03.18

УДК 539.211: 539.25

Вергун Л.Ю.¹, к.ф.-м.н., н.с.,
Свечнікова О.С.², к.ф.-м.н., с.н.с.,
Бобровнік С.Р.³, студ.

Методика обробки експериментальних даних при дослідженні структури епітаксialного шару

^{1,2,3}Київський національний університет
імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: verlen73@ukr.net

L.Yu.Vergun¹, PhD, Sci. Res.,
O.S.Svechnikova², PhD, Sen. Sci. Res.,
S.R.Bobrovnik³, Stud.

Method of processing experimental data for researching of the structure of the epitaxial layer

^{1,2,3}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: verlen73@ukr.net

Запропоновано методику обробки експериментальних даних, отриманих за допомогою атомно-силового мікроскопу, при дослідженні структури епітаксialного шару. Суть цієї методики полягає в тому, що поверхня описується за допомогою традиційної континуальної моделі, згідно з якою вертикальне зміщення точок поверхні від площини описується випадковим полем. Проведено апробацію запропонованої методики шляхом обробки експериментальних даних, які характеризують поверхню плівки, що утворилась внаслідок затвердіння 40% водного розчину глюкози на шліфованій скляній підкладці. Для досліджуваної системи визначено усереднений рельєф поверхні.

Ключові слова: епітаксія, атомно-силова мікроскопія, рельєф поверхні

The method of processing experimental data of an atomic-force microscope at the investigation of the structure of the epitaxial layer is proposed. In this method the surface is described by using a traditional continuum model. According to such model the vertical displacement of the points of the surface from the area is described by a random field. The histogram of the distribution of relief on the film surface is analyzed. The displacement distribution functions on histograms are considered as the sum of two functions. These functions correspond to the slow and rapid dependence of the coordinate, which is perpendicular to the surface. An approbation of the proposed method was performed by processing experimental data that characterizes the surface of the film. This film formed as a result of hardening of 40% aqueous glucose solution on a polished glass substrate. The smoothed histograms of displacement distribution are constructed for the studied system. The smoothed histograms contain the maximums. These maximums correspond to the heights of the ledge of the relief of surface. These values are defined with an error is the magnitude of the amplitude of the rapidly fluctuating function. The averaged relief of the investigated surface is constructed according to the obtained data.

Key Words: epitaxy, atomic force microscopy, surface relief

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Як відомо, епітаксією прийнято називати направлений ріст кристалів однієї речовини на підкладці іншої [див, напр. 1]. Дослідженням щодо механізмів епітаксialного росту на поверхні підкладки присвячена значна кількість теоретичних та експериментальних робіт [2-4]. Однак, на даний час одним із актуальних питань є створення моделі для дослідження орієнтації епітаксialного шару щодо поверхні

підкладки [5]. В даній статті пропонується методика обробки результатів, отриманих методом атомно-силової мікроскопії щодо структури поверхні епітаксialного шару, утвореного на твердій підкладці.

Суть запропонованої методики

Поверхню епітаксialного шару в нашому дослідженні будемо описувати, використовуючи традиційну континуальну модель, згідно з якою

вертикальне зміщення точок поверхні від площини $\bar{Z} = 0$ описується випадковим полем

$$\bar{Z} = \bar{Z}(\vec{r}), \quad (1)$$

де $\vec{r}\{x, y\}$ - радіус-вектор, що визначає положення проекції точок поверхні на площині $\bar{Z} = 0$.

Це поле характеризується функцією

$$N = N(\bar{Z}), \quad (2)$$

де N - число випадків, для яких спостерігається дане значення $\bar{Z}$. Це значення називають гістограмою густини розподілу. Гістограму $N(\bar{Z})$ будемо розглядати як суму

$$N(\bar{Z}) = n(\bar{Z}) + n'(\bar{Z}), \quad (3)$$

де $n(\bar{Z})$, $n'(\bar{Z})$ - відповідно, Z функція, що змінюється повільно і швидко.

Будемо розглядати зміщення як суму випадкових величин

$$\underline{Z} = \underline{Z}_1 + \underline{Z}_2 + \dots + \underline{Z}_k, \quad (4)$$

Використовуючи вираз (4) перейдемо до визначення розподілу ймовірностей. Так наприклад, для випадкової величини $\underline{Z}_1$, маємо

$$W(\bar{Z}_1) = \frac{n(\bar{Z}_1)}{\sum_i n(\bar{Z}_{1i})}. \quad (5)$$

Від співвідношення (5) перейдемо до визначення математичного сподівання

$$h_1 = \sum_i \bar{Z}_{1i} W(\bar{Z}_{1i}) \quad (6)$$

та центрованої дисперсії

$$D_1 = \sum_i (\bar{Z}_{1i} - h_1)^2 W(\bar{Z}_{1i}). \quad (7)$$

Як це прийнято, за похибку Δh_1 будемо розглядати величину

$$\Delta h_1 = D_1^{1/2}. \quad (8)$$

Формули, аналогічні рівностям (5-8) зберігають силу і для випадкових величин $\underline{Z}_2$, $\underline{Z}_k$.

Для визначення імовірності реалізації деякого значення у даному випробуванні введемо величину P_i . Так, наприклад, для імовірності P_1 , маємо

$$P_1 = \frac{\sum_i n(\underline{Z}_{1i})}{\sum_i n(\underline{Z}_{1i}) + \sum_i n(\underline{Z}_{2i}) + \sum_i n(\underline{Z}_{3i}) + \sum_i n(\underline{Z}_{ki})}. \quad (9)$$

Аналогічний вигляд приймають рівності для величин P_2 , P_3 , P_k .

Апробація запропонованої методики

Апробуємо запропоновану методику для дослідження поверхні плівки. Для виготовлення зразків використовувались скляні пластини, товщиною 1-1,2 mm (Microscope slides CAT.NO.7101) та рідинну систему- 40% водний розчин глюкози (фармацевтична фірма «Дарниця» АW 20217). Водний розчин глюкози з концентрацією 40% наносився на шліфовану скляну пластину та витримувався протягом 48 годин при температурі 293 К. На рис.1. наведено результат цього дослідження, а саме гістограму $N(\bar{Z})$ шліфованої скляної пластини.

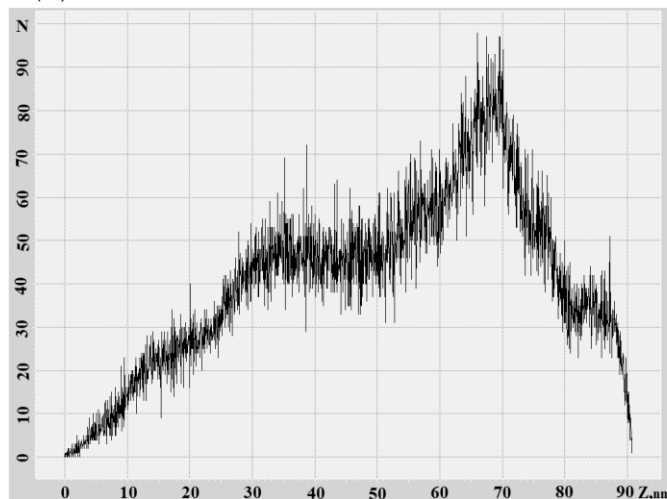


Рис.1. Гістограма розподілу зміщень $N(\bar{Z})$ шліфованої скляної пластини

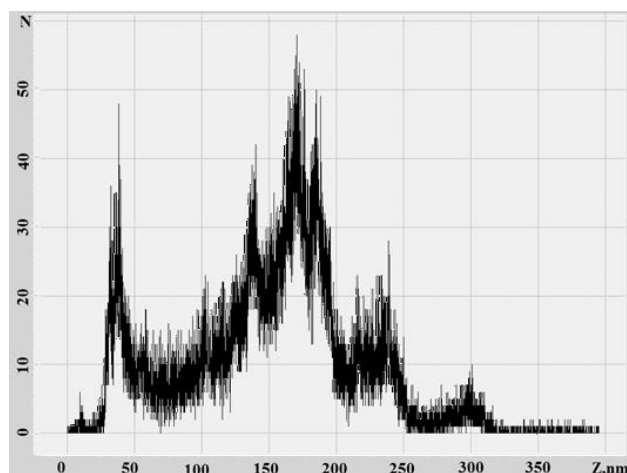


Рис.2. Гістограма розподілу зміщень $N(\bar{Z})$ системи «скляна пластинка – плівка»

На рис. 2. наведено результат цього дослідження, а саме гістограму $N(\bar{Z})$ шліфованої скляної пластини з шаром затверділого 40 % водного розчину глюкози.

На рис. 3. наведено функцію $n(\bar{Z})$, яку домовимося надалі називати згладженою гістограмою. Її значення визначені з похибкою $\pm \Delta n$, де Δn - амплітуди швидко флюктууючої функції.

Як видно з рис. 3 згладжена гістограма містить чотири максимуми. Цей факт дозволить розглядати вказані гістограми як результат накладання чотирьох гістограм, положення яких позначено пунктиром.

Результати розрахунку відповідно до формул (1-8) наведено в табл. 1.

На рис. 4. зображено згладжену гістограму густини розподілу зміщень пластини з шаром затверділого 40% водного розчину глюкози.

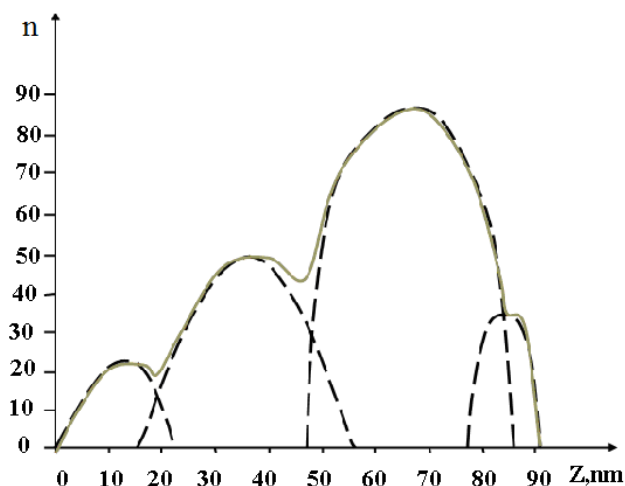


Рис. 3. Згладжена гістограма густини розподілу зміщень шліфованої скляної пластини

Таблиця 1
Параметри, що характеризують поверхню
скляної шліфованої підкладки

Параметр (компонента зміщення)	Математичне сподівання $h(\text{нм})$	Похибка, $\Delta h(\text{нм})$	Імовірність, P	Напівширина горизонтальної ділянки $b/2(\text{нм})$
Z_1	15,1	1,7	0,13	26,0
Z_2	36,4	4,7	0,21	42,0
Z_3	65,4	6,7	0,44	88,0
Z_4	85,6	1,7	0,22	44,0

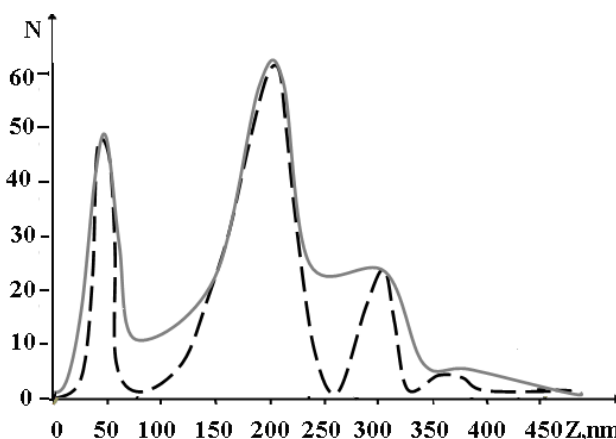


Рис. 4. Згладжена гістограма густини розподілу зміщень шліфованої скляної пластини з затверділим 40% водним розчином глюкози

Таблиця 2
Параметри, що характеризують поверхню скляної шліфованої підкладки з нанесеним затверділим шаром 40% водного розчину глюкози

Параметр (компонента зміщення)	Математичне сподівання $h(\text{нм})$	Похибка, $\Delta h(\text{нм})$	Імовірність, P	Напівширина горизонтальної ділянки $b/2(\text{нм})$
Z_1	38,8	5,6	0,2	40,0
Z_2	165,5	18,4	0,53	106,0
Z_3	229,2	10,7	0,27	54,0
Z_4	299,5	4,9	-	-

Параметри, що характеризують поверхню скляної шліфованої підкладки з нанесеним затверділим шаром 40% водного розчину глюкози наведено в табл. 2.

На основі величин, наведених в табл. 1 та табл. 2, можна запропонувати усереднену модель поверхні. Так, найменша величина h_1 , визначає положення дна западини відносно площини $Z = 0$, а значення b_1 - це ширина цієї ділянки. Та обставина, що залишається ще декілька пар лінійних розмірів ($h_2, b_2; h_3, b_3; h_4, b_4$) означає, що в прийнятій нами усередненій моделі поверхня виступів має ступінчасту форму.

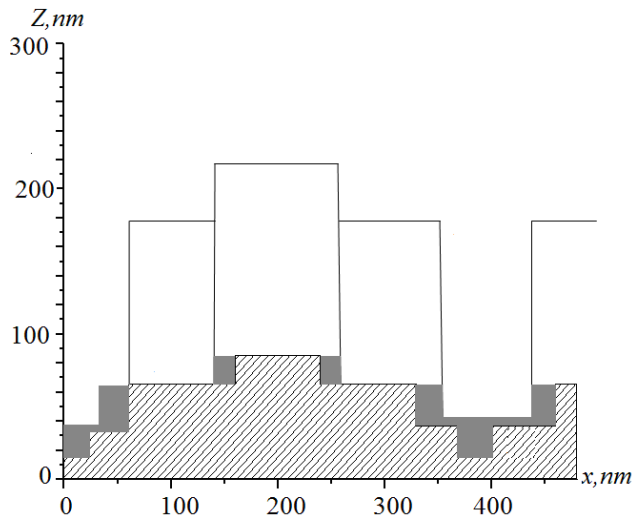


Рис. 5. Структура поверхневого шару системи «тверда підкладка – затверділий шар 40% водного розчину глюкози»

Умовно зробимо розріз усередненої моделі системи через нормаль до площини $Z = 0$. Побудований за даним табл. 1, табл. 2 розріз зображений на рис. 5. На цьому рисунку заштрихована частина розрізу відповідає усередненому рельєфу підкладки.

Висновки

Запропоновано методику обробки результатів, отриманих методом атомно-силової мікроскопії щодо структури поверхні епітаксialного шару, утвореного на твердій підкладці. Проведено апробацію запропонованої методики шляхом визначення параметрів, що характеризують систему «скляна підкладка – водний розчин 40% глюкози» і визначають усереднений рельєф поверхні.

Список використаних джерел

1. Fontcuberta A. Nucleation Mechanism of Gallium-assisted Molecular Beam Epitaxy Growth of Gallium Arsenide Nanowires/ A.Fontcuberta, I. Morral, C.Colombo// *Applied Physics Letters*.-2008.-92.-P.063112-063114.
2. Hooper J. Interplay between Hydrogen Bonding, Epitaxy, and Charge Transfer in the Self-Assembly of Croconic Acid on Au(111) and Ag(111)/ J.Hooper, D.A.Kunkel, E.Zurek// *J. Phys. Chem. C*.- 2015.- 119 (47).-P.26429–26437.
3. Bhattacharya A. Self-Assembly in Semiconductor Epitaxy: From Growth Mechanisms to Device Applications. Chapter 26/ /Arnab Bhattacharya, Bhavtosh Bansal.- *Handbook of Crystal Growth Vol. 3, 2nd Edition*, Ed T. Kuech, Elsevier.2015.-P.1057–1099
4. Turbin P.V. Evolution of Surface Morphology Coatings (Ti-Hf-Si)N on Thermal Action/P.V.Turbin// *PSE*.-2015.-13(3).-P.399-405.
5. Yong Lu. Predicting epitaxial orientations and lattice structure in ultrathin magnetic thin films/Lu Young, Cuiping Wang, Rongpei Shi, Yuanyuan Cui// *APL Materials* .-2016.-7.-P.076102-076108.

References

1. FONTCUBERTA, A., MORRAL, I. & COLOMBO, A. (2008) Nucleation mechanism of gallium-assisted molecular beam epitaxy growth of gallium arsenide nanowires. *Applied Physics Letters*. 92.p. 063112-063114.
2. HOOPER, J., KUNKEL, D.A. & ZUREK, E.(2015) Interplay between Hydrogen Bonding, Epitaxy, and Charge Transfer in the Self-Assembly of Croconic Acid on Au(111) and Ag(111). *J. Phys. Chem. C*.119 (47). p. 26429–26437.
3. BHATTACHARYA, ARNAB, BANSAL, BHAVTOSH. (2015) Assembly in Semiconductor Epitaxy: From Growth Mechanisms to Device Applications. Chapter 26.(2015) *Handbook of Crystal Growth Vol. 3, 2nd Edition*, Ed T. Kuech, Elsevier.-P.p1057–1099.
4. TURBIN, P.V. (2015) Evolution of Surface Morphology Coatings (Ti-Hf-Si)N on Thermal Action. *PSE*. 13(3).p.399-405.
5. YONG, LU, CUIPING, WANG, RONGPEI, SHI (2016) Predicting epitaxial orientations and lattice structure in ultrathin magnetic thin films. *APL Materials* .4(7).p.076102-076108.

Надійшла до редколегії 09.03.18

УДК 538.956

Гребньов О.А.¹, асп.,
Мацуй Л.Ю.¹, д.ф.-м.н., проф.,
Сисоєв В.М.¹, д.ф.-м.н., проф.

Діелектричні властивості водних сумішей системи наноцелюлоза-PNIPAM

¹КНУ ім. Тараса Шевченка, вул. Володимирська,
64/13, 01601 Київ, Україна
e-mail: orticort@gmail.com

O.A. Hreblov¹, PhD stud.,
L.Yu. Matzui¹ Dr.Sci., Prof.,
V.M. Sysoev¹ Dr.Sci., Prof.

Dielectric properties of aqueous suspensions of nanocellulose-PNIPAM system

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv,
Volodymyrska Str., 64/13, 01601 Kyiv, Ukraine
e-mail: orticort@gmail.com

Сучасні технології вимагають створення наноматеріалів із гнучкими властивостями. Один із способів створення таких наноматеріалів – поєднання наночастинок із полімерами, що змінюють поверхневі властивості наночастинок. Наноцелюлоза – це багатообіцяючий наноматеріал із широким спектром застосувань. Водні суміші речовин на основі наноцелюлози можуть знайти застосування для створення сенсорів, систем направленої доставки ліків та ін., тому важливо знати властивості водних сумішей наноцелюлози. У даній роботі досліджено діелектричні властивості водних сумішей наночастинок целюлози із полі-N-ізопропілакриламідом (PNIPAM) у діапазоні частот від 0.1 до 30 ГГц при температурах 22, 32 та 42 °C. Отримані дані проаналізовано із використанням моделі Дебая. Виявлено, що PNIPAM та наноцелюлоза змінюють діелектричні властивості сумішей у заданому діапазоні частот. Час релаксації водневих зв'язків сумішей із PNIPAM збільшується, у той час як час релаксації сумішей із наноцелюлозою зменшується. Суміші, що містять наноцелюлозу та PNIPAM мають діелектричні властивості близькі до діелектричних властивостей води. Цей ефект робить складники «невидимими» на заданому проміжку частот.

Ключові слова: наноцелюлоза, полі-N-ізопропілакриламід, діелектричні властивості

Modern science requires creation of nonmaterials with flexible chemical properties. One of the ways to create such nanomaterials is a combination of nanoparticles with polymers changing the surface properties of the nanoparticles. Nanocellulose is a promising nanomaterial with wide range of applications. The aqueous suspensions of nanocellulose-based constituents might be applied for sensors creation, drug delivery systems and so on, so is it necessary to know properties of the nanocellulose aqueous suspensions. In present work we investigate dielectric properties of aqueous suspensions of cellulose nanoparticles with poly(N-isopropylacrylamide) (PNIPAM) in frequency range of 0.1 to 30 GHz at temperatures of 22, 32 and 42 °C. The achieved data is analyzed using the Debye model. It is found that both, PNIPAM and nanocellulose change the dielectric properties of suspension in given range of frequencies. The relaxation time of hydrogen bonds increases for the suspensions containing the PNIPAM, while the suspensions containing the nanocellulose have the relaxation time decrease. Suspension of nanocellulose with PNIPAM has characteristics close to that of pure water; this effect makes constituents “invisible” in given range of frequencies.

Key words: nanocellulose, poly(N-isopropylacrylamide), dielectric properties

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Introduction

Cellulose has been investigated for decades but in recent years this material became an object of great interest to scientists and engineers. Numerous

researches make accent on profitable properties of cellulose nanoparticles such as biocompatibility, mechanical strength, and chemical flexibility of surface and so on [1]. There are deferent types of cellulose nanoparticles such as nanofibers, nanocrystals, microfibers etc. varying by size, shape

chemical properties. These nanoparticles itself or in combination with other materials are proposed, for example, to apply in medicine, food industry, material science for creation of strong, lightweight materials [2]. However, there are some difficulties in cellulose application, such as hydrophilic-hydrophobic properties of surface preventing its combination with some materials. To overcome this problem it is proposed to use a polymer - poly(N-isopropylacrylamide). Combination of nanocellulose with PNIPAM provides not only possibility to control the surface chemistry of nanocellulose but also gives a promising property – the temperature response. This compound might be applicable for sensors, thus, the investigation of dielectric properties of nanocellulose-PNIPAM system in aqueous media may provide useful results for temperature sensors creation.

In this work we investigate dielectric properties of water, water-PNIPAM solution and aqueous suspensions of cellulose nanocrystals (CNCs) in combination with PNIPAM in frequency range of 0.1 to 30 GHz at temperatures of 22, 32 and 42 °C. The measurements are processed with Debye model.

Experimental section

For the nanocellulose isolation was used soft wood pulp. The CNCs were isolated by common sulphuric acid - hydrolysis method [1]. For the measurements 4 samples were prepared: water, water-PNIPAM, water-CNCs, and water-CNCs-PNIPAM. The concentration of PNIPAM in each sample is 0.04 wt%, the concentration of CNCs in each sample is 5 mg/mL.

The dielectric properties of the aqueous suspensions were investigated by Keysight Network Analyzer N5227A with Agilent Dielectric Probe sensor in the frequency range of 0.1 to 3 GHz at temperatures of 22, 32, 42 (± 1) °C.

Results and discussion

In the given range of frequencies of 0.1 to 3 GHz the hydrogen bonds response can be measured. There are several models describing dielectric relaxation of hydrogen bonds such as Cole-Cole, Davidson-Cole, etc, containing 4 and more parameters representing asymmetry and broadness of the dielectric dispersion curve, however, our experiment accuracy (6% for higher frequencies) do not provide uniquely determine

parameters of models with 4 and more parameters as the mutual dependence of parameters appears. Thus, the Debye model is used to process the measurement data. The Debye equation is given as follows:

$$\varepsilon' - i\varepsilon'' = \varepsilon_{\infty} + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty}}{1 + 2\pi i\nu\tau} \quad (1)$$

where, ν – frequency of electromagnetic field, ε_{∞} - the value of dielectric permittivity at $\nu \rightarrow \infty$, ε_0 – the value of dielectric permittivity at $\nu \rightarrow 0$, τ – characteristic relaxation time.

The real and the imaginary permittivity are derived from equation (1) as follows:

$$\varepsilon' = \varepsilon_{\infty} + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty}}{1 + (2\pi\nu\tau)^2} \quad (2)$$

$$\varepsilon'' = \frac{2\pi\nu\tau(\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty})}{1 + (2\pi\nu\tau)^2} \quad (3)$$

Using equations 2 and 3 the measured data were approximated and the parameters were determined.

Water and water-PNIPAM

The calculated parameters of equations (2) and (3) for water and water-PNIPAM system are shown in table 1.

As it can be seen from figure 1 the addition of PNIPAM to water increases both real and imaginary dielectric permittivity in given of frequencies.

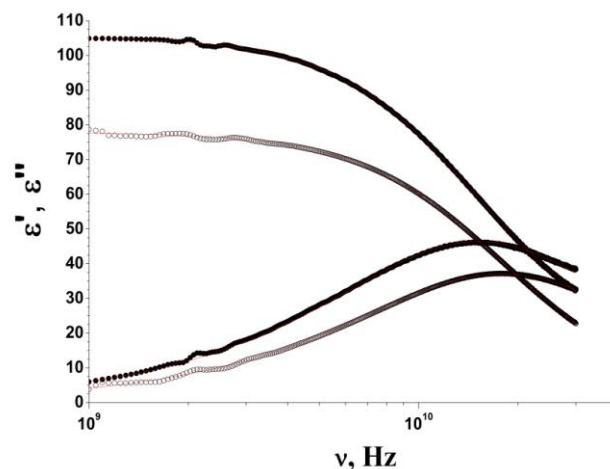


Fig.1 . The real and the imaginary part of permittivity of water (O) and water-PNIPAM (●) suspension at temperature of 22 °C.

Also, the Debye relaxation time for water-PNIPAM suspension increases by 17% from 8.90 to $10.48 \cdot 10^{-12}$ s (table 1).

Table 1.
The parameters of the Debye equation for water and water-PNIPAM system

T, °C	ϵ_0	ϵ_∞	$\tau, 10^{-12}$ s
water			
22	77.7	3.5	8.9
32	77.1	4.9	7.31
42	73.2	0.5	5.49
water-PNIPAM			
22	105.4	12.8	10.48
32	100.2	13.4	7.74
42	96.5	12.3	6.45

The behavior of the real dielectric permittivity of water (bottom curves) and water-PNIPAM (top curves) with temperature change is shown on fig.2.: at lower temperatures the real part of permittivity is greater at lower frequencies and higher at higher frequencies for both samples.

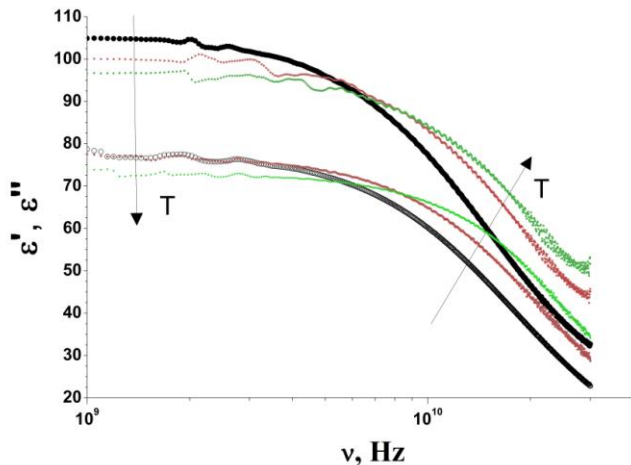


Fig.2. The behavior of real part of permittivity with temperature change: water (lower curves), water-PNIPAM (higher curves).

The relaxation time increase with PNIPAM addition is observed at all temperatures (fig. 3). As it can be seen from the fig.3, temperature dependence of water relaxation time is linear in given range of the temperature; however, the temperature dependence of relaxation time of water-PNIPAM is not linear, due to

thermal response of the polymer. The values of parameter ϵ_0 the Debye equation tend to decrease with temperature increase for both, water and water-PNIPAM system, also, the values of ϵ_0 are greater for water-PNIPAM system.

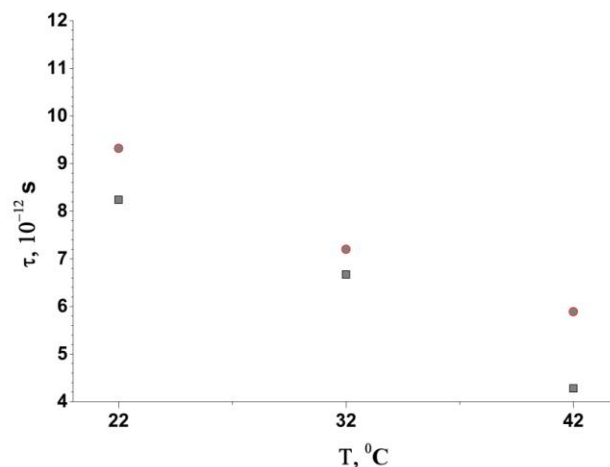


Fig.3. Temperature dependence of relaxation time of water (■) and water-PNIPAM system (●)

Water-CNCs and water-CNCs-PNIPAM

The same calculations were performed for two other samples, water-CNC and water-CNC-PNIPAM.

The behavior of the real and imaginary parts of dielectric permittivity for these two samples is similar to the previous one. However, the calculated data for water-CNCs and water-CNCs-PNIPAM shows different change of relaxation time when PNIPAM is added (table 2).

Table 2.
The parameters of the Debye equation for water-CNCs and water-CNCs-PNIPAM systems

T, °C	ϵ_0	ϵ_∞	$\tau, 10^{-12}$ s
Water-CNCs			
22	78	1.7	8.24
32	73.2	3.1	6.67
42	69	5.6	4.28
water-CNCs-PNIPAM			
22	92.9	4.7	9.32
32	98.6	9.27	7.2
42	94	4	5.89

The addition of CNCs into water causes the decrease in relaxation time comparing to the pure water at all temperatures. Due to presence of CNCs, the addition of PNIPAM does not allow the increase of

relaxation time to the values of water-PNIPAM relaxation times.

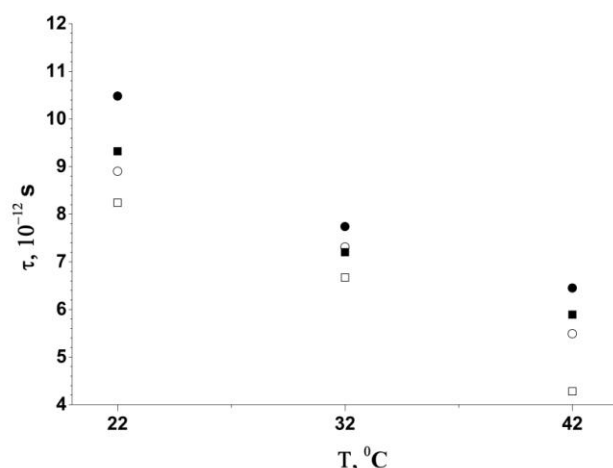


Fig.4. Temperature dependence of relaxation time of water (O), water-PNIPAM (●), water-CNC (□) and water-CNCs-PNIPAM (■) systems

Also, the values of ϵ_0 for these systems do not reach the values of two previous systems. From fig. 4 it can be seen that addition of CNCs into water

decreases the relaxation time, however, the addition of PNIPAM causes the increase of the relaxation time. When both CNCs and PNIPAM are added into water, the relaxation time values approach the values of relaxation time of pure water. Also, the PNIPAM makes temperature dependence non-linear for both samples.

Conclusions

Using Debye model the dielectric spectra of the four samples were analyzed. It was found that PNIPAM increases the relaxation time of all system in given range of frequency, while the CNCs decrease the relaxation time. When combined, the effects changing the relaxation time of system caused by PNIPAM and CNCs tends to compensate each other, so the resulting values of relaxation time are close to that of pure water. This result promoted further investigations with these objects as it is possible there are special proportions of CNCs and PNIPAM giving relaxation time of the system equal to that of pure water, making constituents “invisible” at given range of frequency.

References

Список використаних джерел

1. Наноцелюлоза у тонких плівках, покриттях та шарах для пакування: огляд / [М.А. Хаббл, А. Феррер, П. Т'ягі та ін.] // *BioResources*. – 2017. №12 (1). – С. 2143-2233.
2. Наноцелюлоза, крихітне волокно із величезним потенціалом. / [Т. Абїтбол, А. Рївкін, І. Цао та ін.] // *Current opinion in biotechnology*. – 2017. – №39. – С.76-88.
3. Нанокристали целюлози з різними морфологіями та хїральними властивостями / [В.Ф. Королович, В. Черпак, Н.Р. Шейх та ін.]// *Polymer (Guildf)*. – 2018. – №145. – С. 334-347.
1. HUBBE, M. A., FERRER, A., TYAGI, P., YIN, Y., SALAS, C., PAL, L., & ROJAS, O. J. (2017) Nanocellulose in thin films, coatings, and plies for packaging applications: A review. *BioResources*. 12(1). p.2143-2233.
2. ABITBOL, T., RIVKIN, A., CAO, Y., NEVO, Y., ABRAHAM, E., BEN-SHALOM, T., ... & SHOSEYOV, O. (2016) Nanocellulose, a tiny fiber with huge applications. *Current opinion in biotechnology*. 39. p.76-88.
3. KOROLOVYCH, V.F., CHERPAK, V., NG, A., SHAIKH, N.R., GRANT, A., XIONG, R., BUNNING, T.J., TSUKRUK V. V. (2018) Cellulose nanocrystals with different morphologies and chiral properties. *Polymer (Guildf)*. 145. p.334-347.

Надійшла до редколегії 22.03.18

УДК 532.783

Грідякіна О. В.¹, к.ф.-м.н.,
Білоус О. І.², д.ф.-м.н., доц.,
Свечнікова О. С.³, к.ф.-м.н., с.н.с.

Структура мезофаз і мезоморфних стекел металканоатів

^{1,2}Національний авіаційний університет, 03058,
м. Київ, просп. Космонавта Комарова, 1,
e-mail: ¹morhin@ukr.net,
²bilous2013@gmail.com,
³Київський національний університет імені Тараса
Шевченка, 01601, Київ, вул. Володимирська, 64/13

O. V. Gridyakina¹, PhD.,
O. I. Bilous², Dr. Sci.,
O.S. Svechnikova³, PhD, Sen. Sci. Res.

Structure of mesophases and mesomorphic glasses of metalalkanoates

^{1,2}National Aviation University, 03058, Kyiv,
Kosmonavta Komarova ave. 1,
e-mail: ¹morhin@ukr.net,
²bilous2013@gmail.com,
³Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13

Встановлено структуру мезофаз та мезоморфних стекел гомологічного ряду алканоатів кобальту. Вперше показано, що двошарове пакування молекул (катіон-аніонний прошарок між шарами алканоатних ланцюгів), властиве смектичній А фазі, зберігається і в склоподібному стані при кімнатній температурі.

Ключові слова: іонні термотропні рідкі кристали, алканоати кобальту, мезоморфні стекла, малокутове розсіювання рентгенівських променів.

The structure of the mesophases and mesomorphic glasses of cobalt alkanoates homologous series was obtained. Smectic structure of the studied materials was confirmed using X-ray small angle scattering method. Using this powerful technique, smectic bilayer spacing (in other words, interlayer smectic distance) and its temperature dependence were measured for all studied materials. Typical temperature dependence of the bilayer spacing was obtained: under heating the value of bilayer spacing slightly decreases until phase transition temperature and then decreases sharply. After that, liquid crystals were cooled and values of bilayer spacing preserved the same as at mesophase temperature. It means that under cooling liquid crystalline smectic structure was "frozen" into vitrified state. Such a behavior of the dependence bilayer spacing versus temperature confirms both smectic structure of the studied materials and mesomorphic glass formation which takes place under cooling from liquid crystalline state until room temperature. Also, the model of bilayer allocation of the molecules in the crystal, mesophase and in the vitreous state was proposed.

Key Words: ionic thermotropic liquid crystals, mesomorphic glasses, cobalt alkanoates, method of X-ray small-angle scattering.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф., академік НАН України Булавін Л.А.

Вступ

Пошук та дослідження нових матеріалів, перспективних для розробки і створення пристроїв збереження та обробки інформації, є одним з важливих напрямків розвитку сучасної науки. У зв'язку з цим останнім часом велику увагу приділяють дослідженням нетрадиційних класів рідких кристалів (РК). Незвичайні властивості цих матеріалів відкривають нові можливості для найрізноманітніших практичних застосувань. Велике значення має температура плавлення та інтервал існування мезофаз – оскільки для практичного застосування потрібні РК матеріали з низькими температурами

плавлення, які здатні існувати за кімнатної температури у стані РК скла. Солі алканових кислот $C_nH_{2n+1}COOM$ утворюють під час плавлення термотропні іонні рідкі кристали (ТІРК), яким притаманна висока власна іонна провідність, широкий інтервал існування мезофаз, висока термостабільність і здатність до склоутворення [1]. Проте їх використання як нових функціональних матеріалів часто обмежується високими температурами плавлення [1-2]. Зменшення температури плавлення спостерігають для багатокомпонентних РК систем, до складу яких входять дві, три і більше індивідуальних сполуки приблизно однакової хімічної природи.

Методи та об'єкти дослідження

Для встановлення характеру впорядкування молекул, а також його зміни при фазових перетвореннях нами методом малокутового розсіювання рентгенівських променів було проведено дослідження октаноату кобальту $(C_7H_{15}COO^-)_2Co^{2+}$ ($T_{nl} = 93^\circ C$, $T_{np} \approx 164^\circ C$), деканоату кобальту $(C_9H_{19}COO^-)_2Co^{2+}$ ($T_{nl} = 82^\circ C$, $T_{np} > 300^\circ C$) та свинцю $(C_9H_{19}COO^-)_2Pb^{2+}$ ($T_{nl} = 87^\circ C$, $T_{np} = 114^\circ C$), бінарної суміші $Pb^{2+}, Co^{2+} | (C_9H_{19}COO^-)_2$ (відповідно 60 : 40 мол.%; $T_{nl} = 83^\circ C$, $T_{np} = 92^\circ C$), а також лаурату кобальту $(C_{11}H_{21}COO^-)_2Co^{2+}$ ($T_{nl} = 88^\circ C$, $T_{np} > 300^\circ C$).

Вимірювання проводились на малокутовому дифрактометрі з щільною колімаційною системою. Використовувалось монохроматизоване $CuK\alpha$ - випромінювання рентгенівської трубки потужністю 1,2 кВ, монохроматор – нікелева фольга, розмір сфокусованої плями 0,4x8 мм. Діапазон вимірювання кутів 2θ – від 0.1° до 20° , роздільна здатність колімаційної системи становила 0.02° . Температура вимірювалась за допомогою термopари мідь-константан, з точністю $0.2^\circ C$. Вимірювання проводили як у напрямі зростання температури, так і у напрямі її зменшення.

Результати та обговорення

Дослідження сполуки деканоату свинцю засвідчило, що в кристалічному стані в температурному інтервалі ($30-80^\circ C$) в області кута $2\theta \approx 2,85^\circ$ спостерігається інтенсивний дифракційний максимум (рис. 1). Розрахована за формулою Вульфа-Брегга $2d \sin \theta = m\lambda$ ($m=1$) періодичність у всьому вказаному температурному інтервалі фактично не змінюється і становить $d_{крис} \sim 31 \text{ \AA}$. За температури близької до $\sim 86^\circ C$ зафіксовано зменшення періодичності на $\Delta d \sim 1,5 \text{ \AA}$ (рис. 2А), яке можна пояснити переходом до іншої поліморфної кристалічної модифікації з характерним для мезогенних кристалів розупорядкуванням алкільних ланцюгів молекул [1, 3-4].

За температури $\sim 94^\circ C$ відбувається різке скорочення періодичності до $d_{мезоф} \sim 23 \text{ \AA}$ (рис. 2А), при цьому характер рентгенограми свідчить (рис. 1, крива 1), що навіть для неорієнтованого РК зразка спостерігається досить інтенсивний і вузький дифракційний максимум,

який є типовим для смектика А, і який вказує на досить якісне міжшарове впорядкування молекул.

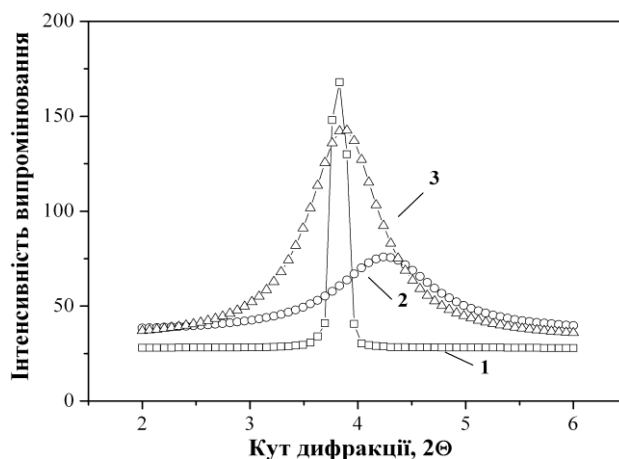


Рис. 1. Залежність інтенсивності розсіювання рентгенівських променів в мезофазі від кута 2θ для зрізу деканоату свинцю ($102^\circ C$) – крива 1, для деканату кобальту ($85^\circ C$) – крива 2, для бінарної суміші ($88^\circ C$) (60:40 мол. %) – крива 3.

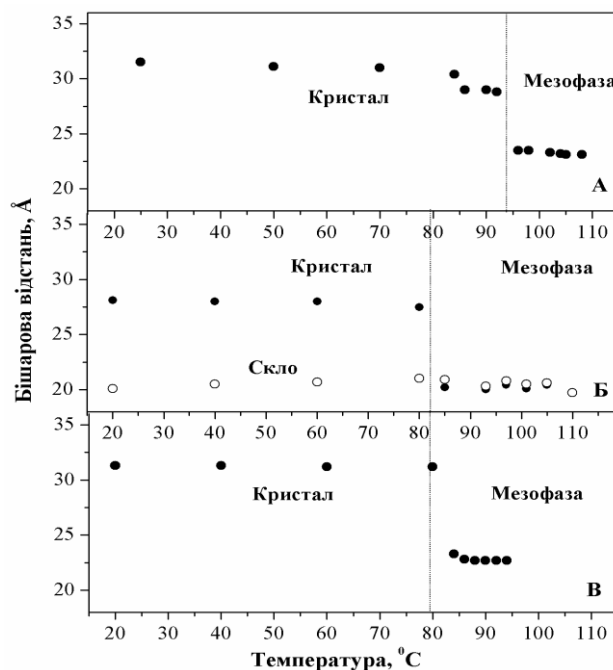


Рис. 2. Температурна залежність міжшарової періодичності полікристалічних зразків (● – нагрівання, ○ – охолодження): А – деканоат свинцю; Б – деканоат кобальту; В – бінарна суміш (60:40 мол. %).

Це підтверджується тим фактом, що розрахована за формулою Дебая-Шеррера $\zeta_{II} = \lambda / \beta \cos \theta$ (λ – довжина рентгенівської хвилі, β – ширина дифракційного максимуму на

половині висоти в радіанах, θ – кут дифракції) кореляційна міжшарова довжина становить $\xi_{\parallel} \approx 1000 \text{ \AA}$.

Для з'ясування характеру пакування молекул $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Pb}^{2+}$ в кристалі та у мезофазі ми за допомогою програми молекулярного моделювання CS Chem3D розраховали довжину молекули в найбільш видовженому її стані. При розрахунках враховували іонний радіус свинцю

$r_{\text{іон}}^{\text{Pb}} = 1,19 \text{ \AA}$ [5], а також ван-дер-ваальсівський радіус атомів водню $r_{\text{H}} = 1,2 \text{ \AA}$ [5] кінцевих метильних груп в алкільних ланцюгах молекул. Встановлено, що експериментальний періодичності $d_{\text{кріст}} \sim 31 \text{ \AA}$ може відповідати лише бішарове розміщення видовжених осей молекул $l_{\text{теор}} \sim 31,2 \text{ \AA}$ з їх приблизно перпендикулярною орієнтацією до площини між шарами. Оскільки за оптичними даними (коноскопична картина у вигляді одновісних хрестів) сполука $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Pb}^{2+}$ утворює смектичну мезофазу типу А, то різке зменшення періодичної відстані у мезофазі означає, що при фазовому перетворенні відбувається стрибкоподібне стиснення катіон-аніонних шарів. Величина стиснення $\sim 8 \text{ \AA}$ відповідає взаємному бішаровому проникненню деканоатних “хвостів” молекул приблизно на $\sim 4 \text{ \AA}$.

Зменшення міжшарової відстані при фазовому перетворенні кристал – смектична фаза спостерігають як для термотропних молекулярних [6], так і іонних [7] РК. Таке стиснення пояснюється конформаційною розупорядкованістю алкільних “хвостів” молекул з підвищенням температури, їх взаємопроникненням, а також статистичним нахилом молекул до площини шарів. Проте для іонних термотропних рідких кристалів суттєвим додатковим фактором стиснення є далекодіюча електростатична взаємодія. Вона з одного боку за рахунок відштовхування уздовж шарів їх розрихлює, а з іншого боку у напрямі, перпендикулярному до шарів, завдяки притяганню, намагається їх стиснути.

На відміну від $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Pb}^{2+}$ для сполуки $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Co}^{2+}$ в мезофазі спостерігається широкий дифракційний

максимум (рис. 1, крива 2). Розрахована за дифракційним максимумом кореляційна довжина для мезофазі складає лише $\xi_{\parallel} \approx 50 \text{ \AA}$.

Сполука $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Co}^{2+}$ також характеризується бішаровим упорядкуванням молекул як у кристалічному стані, так і в мезофазі (смектик А). Період бішарів складає приблизно $d_{\text{кріст}} \sim 28 \text{ \AA}$ – в кристалі і $d_{\text{мезоф}} \sim 20 \text{ \AA}$ – в мезофазі (рис. 2Б). Величина стиснення ($\sim 8 \text{ \AA}$) при фазовому перетворенні кристал – мезофаза така сама, як і для $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Pb}^{2+}$.

Згідно з розрахунками довжина молекули $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Co}^{2+}$ (іонний радіус кобальту $r_{\text{іон}}^{\text{Co}} = 0,74 \text{ \AA}$ [5]) у найбільш видовженому стані становить $l_{\text{теор}} \sim 30,7 \text{ \AA}$, а в кристалі $d_{\text{кріст}} \sim 28 \text{ \AA}$. Це означає, що у кристалічному стані молекули або не мають максимально анізотричної форми, або їх довгі осі дещо нахилені до міжшарової площини (максимальний кут відхилення від нормалі до площини $\sim 24^\circ$), або те й інше разом. Зазначимо, що кут відхилення $\sim 24^\circ$ не є великим. Зазвичай для класичних молекулярних мезогенних кристалів, що утворюють смектичну А фазу, він може досягати $\sim 50-60^\circ$ [6]. Нахил молекул у кристалічному стані є енергетично вигідним і це узгоджується з принципом найщільнішого пакування молекул за типом горб – западина [8].

Оскільки деканоат кобальту $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Co}^{2+}$ при охолодженні здатний до склоутворення, то було проведено дослідження його склоподібного стану. Для цього вимикали термостат і сліdkували за зміною величини періоду в залежності від температури аж до кімнатної. Потім діставали зразок і перевіряли, що він знаходиться в стані скла.

Як видно з рис. 2Б, величина періоду при охолодженні практично не змінюється і приблизно дорівнює $d_{\text{скло}} \sim 21 \text{ \AA}$. Кореляційна довжина за кімнатної температури в стані скла така сама, як і в мезофазі ($\xi_{\parallel} \approx 50 \text{ \AA}$). Це означає, що характер бішарового впорядкування молекул в смектику А і в склі однаковий, тобто маємо смектичне скло. Цей стан речовини стабільний і зберігається довгий час – до кількох місяців.

Малокутове рентгенівське дослідження двокомпонентної системи $\text{Pb}^{2+}, \text{Co}^{2+} | (\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2$ з вміщенням 40 мол. % $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Co}^{2+}$ показало, що дифракційна картина (рис. 1, крива 3) для мезофазі є близькою до індивідуальної сполуки $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Pb}^{2+}$. Кореляційна довжина смектичного впорядкування для бінарної системи дорівнює $\xi_{\parallel} \approx 200 \text{ \AA}$, при цьому періоди бішарів у кристалічному стані ($d_{\text{крис}} \sim 31 \text{ \AA}$) і в смектичній А мезофазі ($d_{\text{мезоф}} \sim 23 \text{ \AA}$) (рис. 2В) збігаються з аналогічними величинами індивідуальної сполуки $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Pb}^{2+}$.

Отже, проведені дослідження бінарної системи показало, що дифракційна картина має характеристики обох індивідуальних сполук, що входять до її складу, при цьому сполука $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Pb}^{2+}$ виконує роль орієнтуючої матриці. Зокрема, кореляційна довжина в бінарній системі збільшилася в чотири рази в порівнянні з індивідуальною сполукою $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Co}^{2+}$. Це свідчить про якісніше впорядкування смектичних бішарів у бінарній системі, ніж в $(\text{C}_9\text{H}_{19}\text{COO}^-)_2\text{Co}^{2+}$. Однак слід зазначити, що для бінарної системи температура плавлення залишилася високою ($\sim 82^\circ\text{C}$). Окрім цього, як власно і деканоат свинцю, вона не здатна до склоутворення, що суттєво обмежує її використання.

Здатність до склоутворення проявляє сполука лаурату $(\text{C}_{11}\text{H}_{21}\text{COO}^-)_2\text{Co}^{2+}$ кобальту. На дифрактограмі досліджуваного зразка в інтервалі температур від кімнатної до $\sim 82^\circ\text{C}$ спостерігається чіткий інтенсивний дифракційний максимум від кристалу (рис. 3, крива 1). Його кутові положення свідчить, що при нагріванні бішарова відстань у кристалі зменшується від $d_{\text{крис}} \sim 36 \text{ \AA}$ (за розрахунками $l_{\text{теор}} \sim 35,8 \text{ \AA}$) до $d_{\text{крис}} \sim 33 \text{ \AA}$ (рис. 4). Це характерно для більшості РК сполук, особливо тих, що мають довгі алкільні ланцюги [1, 6], і пов'язано з їх розупорядкуванням з підвищенням температури. Перехід у мезофазу (рис. 3, крива 2) супроводжується різким скороченням бішарової періодичності $d_{\text{мезоф}} \sim 21 \text{ \AA}$, яка в мезофазі практично не змінюється аж до $170 - 180^\circ\text{C}$

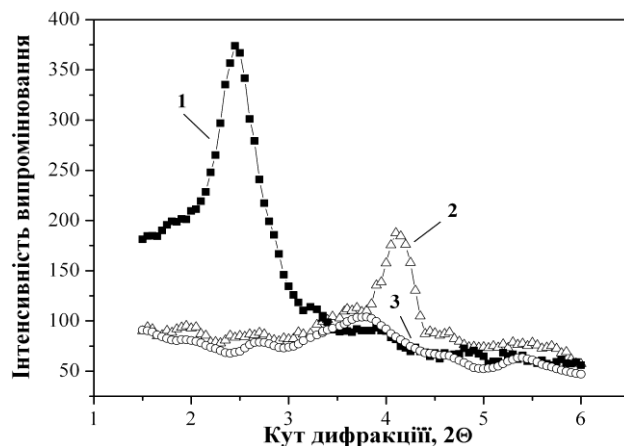


Рис.3 Рентгенівські дифрактограми зразка лаурату кобальту в кристалічному (крива 1), мезоморфному (крива 2) та склоподібному (крива 3) станах.

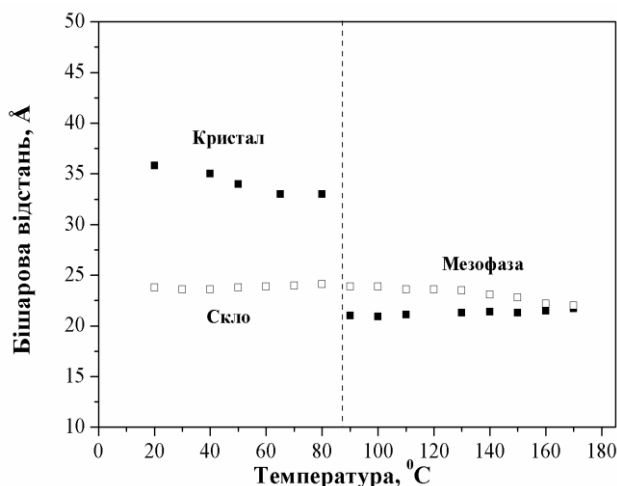


Рис. 4. Температурна залежність бішарової відстані при нагріванні та охолодженні зразка лаурату кобальту. ■ – відповідає вимірюванням при нагріванні, □ – при охолодженні.

(рис. 4). Величина скорочення найбільша з досліджених сполук і становить $\sim (12 - 15) \text{ \AA}$, що також притаманно саме для РК сполук з найдовшими алкільними ланцюгами [1, 6].

При охолодженні зразка утворюється склоподібний стан (рис. 3, крива 3) з величиною $d_{\text{скло}} \sim 23 \text{ \AA}$, близькою до її значення в смектичній А мезофазі (рис. 4). Кореляційна довжина в мезофазі $\xi_{\parallel} \approx 220 \text{ \AA}$ помітно більша ніж у склі $\xi_{\parallel} \approx 130 \text{ \AA}$, що свідчить про меншу впорядкованість у склоподібному стані, проте цей стан є стабільним і довготривалим за кімнатної температури.

Малокутові рентгенівські дослідження октаноату $(C_7H_{15}COO^-)_2Co^{2+}$ кобальту засвідчили, що кристал, смектична А фаза та смектичне скло також мають бішаровий характер пакування молекул. На дифрактограмі від кристалу спостерігається дифракційний максимум, інтенсивність якого при переході в мезофазу та у стан скла зменшується (рис. 5).

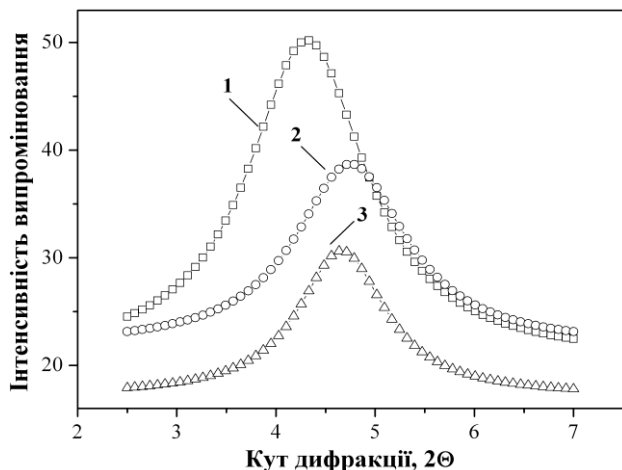


Рис. 5. Рентгенограма октаноату кобальту в кристалі (крива 1), мезофазі (крива 2) та у склоподібному стані (крива 3).

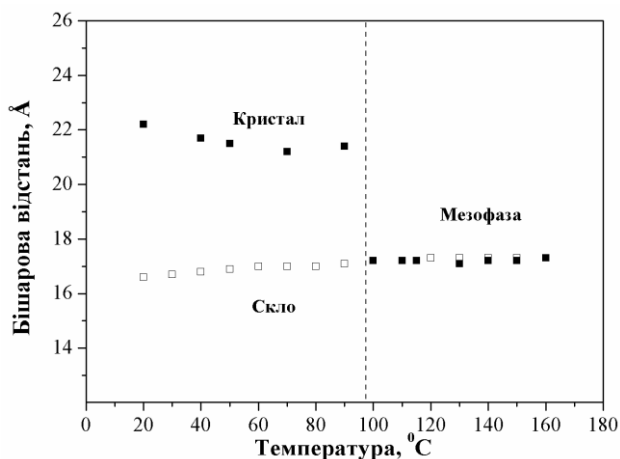


Рис. 6. Температурна залежність бішарової відстані для октаноату кобальту в кристалі, мезофазі та у стані скла:
■ – відповідає вимірюванням при нагріванні,
□ – при охолодженні.

Величина періоду в кристалічному стані $d_{\text{крист}} \sim 21,5 \text{ Å}$ (рис. 6) виявилась помітно меншою за очікувану. За розрахунковими даними у найбільше видовженому стані довжина молекули $(C_7H_{15}COO^-)_2Co^{2+}$ має дорівнювати

$l_{\text{теор}} \sim 25,7 \text{ Å}$. Це означає, що на відміну від гомолога $(C_9H_{19}COO^-)_2Co^{2+}$ в кристалі $(C_7H_{15}COO^-)_2Co^{2+}$ видовжені осі молекул більш нахилені до міжшарової площини (максимальне відхилення від нормалі до площини ($\sim 33^\circ$). При переході з кристалічного стану в смектичну А фазу цей нахил зникає, і одночасно за рахунок взаємного проникнення алкільних ланцюгів молекул відбувається зменшення бішарової періодичності від $d_{\text{крист}} \sim 21,5 \text{ Å}$ – в кристалі до $d_{\text{мезоф}} \sim 17 \text{ Å}$ – у мезофазі. Ураховуючи, що максимальна довжина молекули $l_{\text{теор}} \sim 25,7 \text{ Å}$, а товщина бішару в смектичній А фазі і в склі $\sim 17 \text{ Å}$ (рис. 6), то максимальне взаємне проникнення хвостів молекул приблизно дорівнює $\sim 4,4 \text{ Å}$.

Періодичності в мезофазі та склі (рис. 6), а також кореляційні довжини ($\xi_{\parallel} \approx 65 \text{ Å}$ та $\xi_{\parallel} \approx 75 \text{ Å}$ відповідно) є близькими. Це дає підстави стверджувати, що мезофаза і скло мають ідентичний характер упорядкування молекул.

Висновки

Малокутові рентгенівські дослідження ТІРК показали, що при фазовому переході з кристалічного стану в мезофазу відбувається різке скорочення міжшарової періодичності, яке зберігається і в склоподібному стані аж до кімнатної температури. Таке стрибкоподібне стиснення смектичних шарів зумовлено конформаційною неупорядкованістю алкільних ланцюгів молекул та далекодіючою електростатичною взаємодією.

Побудовано модель бішарового розміщення молекул в кристалі, мезофазі та в склоподібному стані. Для мезофазі і скла характерною особливістю впорядкування є міжшарове взаємопроникнення розупорядкованих алкільних ланцюгів молекул на $\sim (4-7) \text{ Å}$. Величини кореляційних довжин у склоподібному стані свідчать, що скло має смектичну структуру з чіткою орієнтацією видовжених осей молекул в межах від двох до шести бішарових відстаней.

Список використаних джерел

1. Мирная Т. А. Жидкокристаллическое состояние солевых расплавов с органическими ионами / Т. А. Мирная, В. Д. Присяжный, В. А. Щербаков // Успехи химии. – 1989. – №9. – С. 1429-1450.
2. Гарбовський Ю. А. Транспортні та нелінійно-оптичні властивості композитів на основі іонних рідких кристалів метал-алканоатів : дис. канд. фіз.-мат. наук : 01.04.15 / Гарбовський Юрій Анатолійович – Київ, 2007. – 114 с.
3. Demus D. Textures of liquid crystals / D. Demus, L. Richter. – Leipzig: Dt.Verl.für Grundstoff-industrie, 1980. – 471 p.
4. Mirnaya T. A. Liquid crystals in binary systems of lead decanoate with zinc or cadmium decanoate / T. A. Mirnaya, L. S. Sudovtsova, G. G. Yaremchuk // Zeitschrift für Naturforschung. – 2000. – V. 55a. – P. 899-901.
5. Бацанов С. С. Экспериментальные основы структурной химии / С. С. Бацанов. – М.: Стандарты, 1986. – 240 с.
6. Зоркий П. М. Структурные исследования жидких кристаллов / П. М. Зоркий, Т. В. Тимофеев, А. П. Полищук // Успехи химии. – 1989. – №12. – С. 1971-2010.
7. Lindau J. Thermisches Phasenverhalten von Thallium(I) salzen aliphatischer Karbonsäuren / J. Lindau, S. Diele, H. Kreger, H.-D. Dorfler // Zeitschrift für Physikalische Chemie. – 1981. – №5. – P. 775-784.
8. Китайгородский А. И. Молекулярные кристаллы / А. И. Китайгородский. – М.: Наука, 1970. – 424 с.

References

1. MIRNAYA, T., PRISYAZHNYJ, V. & SHHERBAKOV, V. (1989) Liquid crystalline state of salt melts with organic ions. *Uspehi himii*. 58 (9). p. 1429-1450.
2. Garbovsky, Yu. A. (2007), "Transport and nonlinear-optical properties of composites based on ionic liquid crystal of metal alkanoates", Ph.D. Thesis, Physics of molecular and liquid crystals, Institute of physics, Kyiv, UA.
3. DEMUS, D. and RICHTER, L. (1980) *Textures of liquid crystals*. Leipzig: Dt.Verl.für Grundstoff-industrie.
4. MIRNAYA, T., SUDOVTSOVA, L. & YAREMCHUK, G. (2000) Liquid crystals in binary systems of lead decanoate with zinc or cadmium decanoate. *Zeitschrift für Naturforschung*. 55(a). p. 899-901.
5. BATSANOV, C. (1986) *Experimental fundamentals of structural chemistry*. Moskva: Standarts.
6. ZORKIJ, P., TIMOFEEV, T. & POLISHCHUK, A. (1989) Structural studies of liquid crystals. *Uspehi himii*. 58 (12). p. 1971-2010.
7. LINDAU, J., DIELE, S., KREGER, H. & DORFLER, H.-D. (1981) Thermisches Phasenverhalten von Thallium(I) salzen aliphatischer Karbonsäuren. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*. 5. p.775-784.
8. KITAJGORODSKIJ, A. (1970) *Molecular crystals*. Moskva: Nauka.

Надійшла до редколегії 22.03.18

УДК 532.74

Дорошенко І. Ю.¹, д.ф.-м.н.,
Васильєва А. О.², асп.,
Шакула Г. Є.³, студ.,
Погорелов В. Є.⁴, д.ф.-м.н., проф.

Конформаційний аналіз димерів етанолу в матричній ізоляції

^{1,2,3,4}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: ¹dori11@ukr.net,
²tonyavasileva1@gmail.com,
³swrqmail@gmail.com,
⁴pvy@ukr.net

I. Yu. Doroshenko¹, Dr. Sci.,
A. O. Vasyliieva², PhD stud.,
G. Ye. Shakula³, stud.,
V. Ye. Pogorelov⁴, Dr. Sci., Prof.

Conformational analysis of ethanol dimers in matrix isolation

^{1,2,3,4}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: ¹dori11@ukr.net,
²tonyavasileva1@gmail.com,
³swrqmail@gmail.com,
⁴pvy@ukr.net

Методами квантової хімії розраховані геометричні та енергетичні параметри транс- і гош-конформерів етанолу та можливих конфігурацій димерів, а також відповідні коливальні спектри. Отримані дані використані для визначення конформаційного складу димерів етанолу, ізольованих в низькотемпературній аргонівій матриці.

Ключові слова: етанол, конформер, гош-, транс-, матрична ізоляція.

Matrix isolation method allows considering isolated molecules and small clusters as non-interacting ones, so their vibrational spectra can be registered and investigated. FTIR spectra of ethanol trapped in a low-temperature argon matrix at 20 K were registered. Vibrational bands corresponding to ethanol monomers and dimers were detected. It is known that ethanol molecule can exist in two different conformations – trans- and gauche- ones. Quantum chemical methods (DFT in B3LYP/cc-pVTZ approximation) were used for calculation of optimal geometry and energies of ethanol trans- and gauche-conformers and their possible dimers (tt, tg, gt, gg), as well as corresponding vibrational spectra. Obtained results were used for interpretation of the experimental FTIR spectra. It was shown that an energy difference between gauche- and trans-conformers is about 0,3 kJ/mol. Calculations of dissociation energies for all possible dimer configurations show that the most stable conformer is gg. The ratio of different dimer configurations in the sample was found to be the following: gg : tt : tg : gt ≈ 49 : 26 : 14 : 11.

Key Words: ethanol, conformer, gauche-, trans-, matrix isolation.

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Молекула етанолу існує у двох різних конформаціях – транс- (t), коли двогранний кут ССОН рівний 180°, і гош- (g), коли двогранний кут ССОН рівний 60°. Ці конформери (або поворотні ізомери), поєднуючись у кластери, утворюють різні комбінації. Наприклад, для димерів можливі такі конфігурації: tt, tg, gt і gg, де перша літера позначає молекулу, що виступає донором протона при формуванні водневого зв'язку, а друга – молекулу, що відіграє роль акцептора протона. Метою даної роботи є визначення конформаційного складу димерів, які утворюються при ізоляції етанолу в низькотемпературній аргонівій матриці.

Експериментальна частина

Метод матричної ізоляції полягає у розділенні молекул досліджуваної речовини інертним розчинником, що перешкоджає їх взаємодії між собою, дозволяючи таким чином спектрально досліджувати окремі молекули або невеликі кластери. Зразки для спектроскопічних досліджень виготовлялись шляхом змішування парів етанолу із ступенем очищення > 99,9, витриманому додатково на молекулярному ситі для очищення від молекул води, та аргону (ступінь очищення > 99,995) у вакуумній установці в співвідношенні 1:1000. Отримана суміш газів наносилась на охолоджену до 20 К підкладку (CsI), яка знаходилась у гелієвому кріостаті. Потік газу в

кріостаті контролювався за допомогою голкового клапану, швидкість нанесення становила приблизно 2 ммоль/хв.

Спектри ІЧ поглинання реєструвались за допомогою FTIR спектрометра Bruker IFS 113. Спектральні дані були отримані в діапазоні 500 – 4000 см^{-1} з роздільною здатністю 1 см^{-1} . Задля збільшення співвідношення сигнал-шум кожен спектр реєструвався як усереднення 128 сканів.

Квантово-хімічне моделювання

Розрахунки виконувались з використанням пакету Gaussian 03 [1] методом DFT в наближенні B3LYP/cc-pVTZ. В результаті оптимізації геометричної структури транс- та гош-конформерів етанолу були отримані значення їхніх геометричних параметрів та дипольних моментів, наведені в табл. 1.

Таблиця 1

Розраховані геометричні параметри та дипольні моменти транс- і гош-конформерів етанолу

Параметр	t	g
C – O, Å	1,42	1,43
O – H, Å	0,97	0,96
C – C, Å	1,52	1,52
C – H ¹ , Å	1,10	1,09
C – H ² , Å	1,11	1,09
C – O – H, °	107,8	108,4
C – C – H ¹ , °	110,4	111,0
C – C – H ² , °	109,8	110,3
Дипольний момент, Д	1,53	1,60

H¹ – атом гідрогену метильної групи, H² – атом гідрогену метиленової групи.

Для оптимізованих структур були розраховані спектри ІЧ поглинання. Процес формування водневого зв'язку найсильніше проявляється в області валентних коливань гідроксильної групи, тому в подальшому будемо розглядати лише цю спектральну область. Розраховане значення частоти валентних коливань ОН-групи транс-конформера становить 3781 см^{-1} , гош-конформера – 3812 см^{-1} . Різниця частот між розрахованими смугами двох конформерів становить 31 см^{-1} . Розрахунок значень енергій відповідних конформерів показав, що енергія транс-конформера приблизно на 0,3 кДж/моль менша, ніж енергія гош-конформера. Такий результат добре узгоджується з результатами розрахунків, представлених в роботі [2], де різниця в енергіях була близько 0,5 кДж/моль.

На основі оптимізованих структур були побудовані всі можливі варіанти димерів, та розраховані їхні геометричні параметри. Результати розрахунків наведені в табл. 2. Для порівняння розрахованих параметрів з експериментальними даними в цій же таблиці наведено значення деяких геометричних параметрів, отриманих в роботі [3] для конфігурації tt (випадок, коли і донор, і акцептор протона перебувають у транс-конформації) методом найменших квадратів, спираючись на експериментальні значення моментів інерції, в програмі STRFIT [4]. З порівняння наведених результатів видно, що результати проведених квантово-хімічних розрахунків досить добре корелюють з експериментальними даними, тобто обрані потенціали можна використовувати і для моделювання кластерів більшого розміру.

Таблиця 2

Розраховані та відомі з літератури [3] експериментальні значення геометричних параметрів димерів етанолу (індекси a, d вказують на відповідність фрагмента до акцептора чи донора протона)

Параметр	tt	tg	gt	gg	Експ. (tt)
(C – O) ^d , Å	1,42	1,42	1,42	1,42	1,35
(C – O) ^a , Å	1,44	1,44	1,44	1,44	1,47
(O – H) ^d , Å	0,97	0,97	0,97	0,97	
(O – H) ^a , Å	0,96	0,96	0,96	0,96	
(C – C) ^d , Å	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
(C – C) ^a , Å	1,51	1,52	1,51	1,52	1,49
O ... H, Å	1,91	1,91	1,92	1,92	
O ... O, Å	2,88	2,87	2,88	2,87	2,89
(C – O – H) ^d , °	108,9	109,2	108,7	108,1	110,3
(C – O – H) ^a , °	109,0	108,6	109,0	107,7	
O ... H – O, °	173,1	168,3	172,7	164,3	

Аналізуючи дані з табл. 1 і табл. 2, можна помітити, що геометричні параметри молекул, що складають димери, майже не змінюються в порівнянні з мономерами. Зауважимо лише, що у молекулі, яка є донором протона в димері, збільшується довжина зв'язку O – H, а в акцепторній – зменшується у порівнянні з мономером. Таким чином у коливальних спектрах спостерігається червоний зсув відповідної смуги для донорної молекули і синій зсув для акцепторної.

Для всіх можливих конфігурацій димерів були розраховані значення енергій дисоціації на один зв'язок (E_d) та дипольні моменти (табл. 3). Як показують розрахунки, енергетично найбільш вигідною є конфігурація димера gg – коли і донором, і акцептором протона виступають гош-конформери.

Таблиця 3

Розраховані значення енергій дисоціації та дипольних моментів димерів етанолу

Конфігурація	tt	tg	gt	gg
E_d , ккал/моль	4,47	4,42	4,40	4,52
Дипольний момент, Д	2,70	2,41	2,64	2,26

Найменш вигідною, в свою чергу, є конфігурація гош-транс (gt). За умови приблизно однакової кількості гош- і транс-конформерів у зразку з розподілу Больцмана можна знайти співвідношення кількостей окремих конформерів для заданої температури. Таким чином, для температури 20 К відсоткове співвідношення кількості конформерів має вигляд:

$$gg : tt : tg : gt \approx 49 : 26 : 14 : 11.$$

У роботі [3] були отримані подібні теоретичні результати для відносного розподілу димерів:

$$gg > tt > tg \approx gt.$$

Для оптимізованих структур димерів етанолу були розраховані спектри ІЧ поглинання. В області валентних коливань гідроксильної групи для всіх конфігурацій було отримано дві смуги: більш високочастотна смуга відповідає коливанням вільного гідроксилу, тобто відноситься до акцепторної молекули, тоді як більш низькочастотна смуга належить донорній молекулі. Для конфігурації tt частоти цих коливань становили відповідно 3825 та 3661 см^{-1} , для конфігурації tg – 3807 та 3657 см^{-1} , для конфігурації gt – 3824 та 3656 см^{-1} , для конфігурації gg – 3807 та 3649 см^{-1} .

Обговорення результатів та висновки

На рис. 1 наведено експериментально зареєстрований спектр ІЧ поглинання димерів етанолу, ізольованих в аргонівій матриці в області валентних коливань гідроксильної групи.

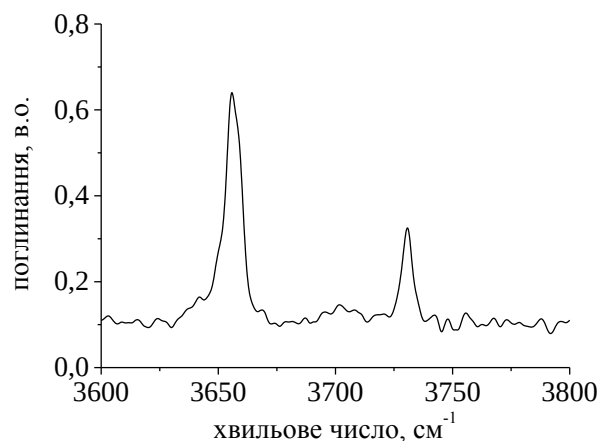


Рис. 1. Спектр ІЧ поглинання димерів етанолу в аргонівій матриці при температурі 20 К.

В зареєстрованому спектрі в даній області спостерігаються дві смуги – 3656 см^{-1} і 3730 см^{-1} . Видно, що положення смуги коливань зв'язаного гідроксилу добре узгоджується з результатами квантово-хімічного моделювання. В результаті розрахунків для чотирьох різних конфігурацій димерів етанолу були отримані такі значення коливальних частот – 3661 см^{-1} , 3657 см^{-1} , 3656 см^{-1} та 3649 см^{-1} . Несиметричність контуру смуги 3656 см^{-1} говорить про те, що ця смуга є суперпозицією декількох коливальних смуг, які відповідають різним конформерам. Розклавши цю смугу за допомогою відповідних програмних засобів на декілька складових, були отримані такі значення максимумів поглинання: 3652 см^{-1} , 3656 см^{-1} і 3659 см^{-1} . З отриманих результатів можна зробити висновок, що в досліджуваному зразку присутні щонайменше три з можливих конфігурацій димерів етанолу.

Коливання вільного гідроксилу спостерігається на 3730 см^{-1} . Квантово-хімічне моделювання дає значення від 3807 см^{-1} до 3825 см^{-1} . Таку розбіжність між теоретичним та експериментальним значеннями можна пояснити тим, що розрахунки проводились в гармонічному наближенні, а водневий зв'язок за своєю природою є ангармонічним. Ангармонічні розрахунки спектрів ІЧ поглинання різних конформерів етанолу були виконані Г. Піцевічем в [5, 6]. У цих роботах аналізувались спектральна

область валентних С-Н коливань ($2800\text{--}3000\text{ см}^{-1}$) та низькочастотна частина спектра ($200\text{--}1500\text{ см}^{-1}$), відповідно, і було показано, що в аргоновій матриці етанол перебуває переважно в транс-конфігурації, хоча найбільш інтенсивні смуги поглинання гош-конформера також спостерігаються. Той факт, що в аргоновій

матриці переважає транс-конформер, відмічали і Барнс і Халлам у своєму дослідженні спектрів етанолу в матричній ізоляції [7]. Пізніше Барнс також писав [8], що температурна залежність смуг поглинання гідроксильної групи етанолу в азотній матриці може бути обумовлена процесами взаємних гош/транс перетворень.

Список використаних джерел

1. Frisch R.J. Gaussian 03, Revision B.05. Gaussian, Inc., Wallington, CT (2004).
2. Pearson J. C. The Millimeter- and Submillimeter-Wave Spectrum of Gauche-Ethyl Alcohol / J.C. Pearson, K.V.L.N. Sastry, E. Herbst, F.C. De Lucia // *Journal of Molecular Spectroscopy*. – 1996. – V. 175. – P. 246 – 261.
3. Loru D. Ethanol dimer: Observation of three new conformers by broadband rotational spectroscopy / D. Loru, I. Pena, M. E. Sanz // *Journal of Molecular Spectroscopy*. – 2017. – V. 335, N1. – P. 93 – 101.
4. Kisiel Z. PROSPE – Programs for Rotational SPECTroscopy. <http://info.ifpan.edu.pl/kisiel/struct/strfit/>
5. Pitsevich G.A. Nonempiric anharmonic computations of IR spectra of ethanol conformers in B3LYP/cc-pVQZ approximation (stretch C—H vibrations) / G.A. Pitsevich, I.Yu. Doroshenko, V.Ye. Pogorelov, et al. // *American Journal of Chemistry*. – 2012. – V. 2. – P. 218-227.
6. Пицевич Г.А. Структура и колебательные спектры гош- и транс-конформеров этанола: неэмпирические ангармонические расчеты и FTIR спектры в аргоновых матрицах / Г.А. Пицевич, И.Ю. Дорошенко, В.Е. Погорелов и др. // *Физика низких температур*. – 2013. – V.39, №4. – P. 499-513.
7. Barnes A.J. Infra-red cryogenic studies. Part 5. – Ethanol and ethanol-d in argon matrices / A. J. Barnes, H. E. Hallam // *Transactions of the Faraday Society*. – 1970. – V. 66. – P. 1932 – 1940.
8. Barnes A.J. Matrix isolation vibrational spectroscopy as a tool for studying conformational isomerism / A. J. Barnes // *Journal of Molecular Structure*. – 1984. – V.113. – P. 161 – 174.

References

1. FRISCH, R.J. (2004) *Gaussian 03, Revision B.05*. Wallington: Gaussian, Inc.
2. PEARSON, J.C., SASTRY, K.V.L.N., HERBST, E. and DE LUCIA, F.C. (1996) The Millimeter- and Submillimeter-Wave Spectrum of Gauche-Ethyl Alcohol. *Journal of Molecular Spectroscopy*. 175(2). p. 246-261.
3. LORU, D., PENA, I. and SANZ, M.E. (2017) Ethanol dimer: Observation of three new conformers by broadband rotational spectroscopy. *Journal of Molecular Spectroscopy*. 335(1). p. 93-101.
4. KISIEL, Z. PROSPE – Programs for Rotational SPECTroscopy. [Online] Available from: <http://info.ifpan.edu.pl/kisiel/struct/strfit/>
5. PITSEVICH, G.A. et al. (2012) Nonempiric anharmonic computations of IR spectra of ethanol conformers in B3LYP/cc-pVQZ approximation (stretch C – H vibrations). *American Journal of Chemistry*. 2(4). p. 218-227.
6. PITSEVICH, G.A. et al. (2013) Structure and vibrational spectra of gauche- and trans-conformers of ethanol: Nonempirical anharmonic calculations and FTIR spectra in argon matrices. *Low Temperature Physics*. 39(4). p. 389–400.
7. BARNES, A.J. and HALLAM, H.E. (1970) Infra-red cryogenic studies. Part 5. – Ethanol and ethanol-d in argon matrices. *Transactions of the Faraday Society*. 66. p. 1932–1940.
8. BARNES, A.J. (1984) Matrix isolation vibrational spectroscopy as a tool for studying conformational isomerism. *Journal of Molecular Structure*. 113. p. 161–174.

Надійшла до редколегії 28.03.18

УДК 535.012.

Кравець В. Г.¹, к.ф.-м.н.,
Ляшенко І. О.³, інж.,
Поперенко Л. В.⁴, д.ф.-м.н., проф.,
Щербakov А. О.⁵, студ.

Підсилення плазмонного резонансу в метало-діелектричних гетероструктурах з поверхневим шаром графена

¹School of Physics and Astronomy, University of
Manchester, Manchester M13 9PL, United Kingdom

^{2,3,4}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail:³plv@univ.kiev.ua,
⁴andre.shcherbakov@gmail.com

V. G. Kravets¹, PhD.,
I. O. Liashenko³, eng.,
L.V. Poperenko⁴, Dr. Sci., Prof.,
A. O. Shcherbakov⁵, stud.

Amplification of plasmon resonance in metal- dielectric hetero-structures with graphene surface layer

¹School of Physics and Astronomy, University of
Manchester, Manchester M13 9PL, United Kingdom

^{2,3,4}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail:³plv@univ.kiev.ua,
⁴andre.shcherbakov@gmail.com

Методами рефлектومتрії в р-поляризованому світлі і багатокутової спектроеліпсометрії виміряно коефіцієнти відбиття і азимуту відновленої лінійної поляризації для різних кутів падіння світла на зразки гетероструктур «хром-мідь-оксид гафнію-графен». Обраховано у наближенні напівнескінченного середовища для плівок «хром-благородний метал (БМ)» (БМ=Cu, Ag чи Au) оптичні сталі: показники заломлення та поглинання для різних довжин хвилі світла. В цих гетероструктурах на мідній основі зафіксовано у видимому діапазоні довжин хвиль ефект плазмонного збудження і визначено найсприятливішу для функціонування таких гетероструктур як оптичних сенсорів область в умовних координатах «довжина хвилі світла зондового пучка -кут його падіння на гетероструктуру».

Ключові слова: рефлектометрія, р-поляризоване світло, багатокутова спектроеліпсометрія, плазмонне збудження, мідь, графен.

The coefficients of reflection and azimuths of the restored linear polarization were measured by methods of reflectometry in p-polarized light and methods multi-angular spectroellipsometry for different angles of incidence on the samples of heterostructures "chrome-copper-hafnia oxide-graphene". The optical constants namely indexes of refraction and absorption of films "chrome-noble metal (NM)" (NM = Cu, Ag or Au) were also calculated for different wavelengths of light in the approximation of semi-infinite area. The plasmon excitation effect was observed in these copper-based heterostructures in the range of the visible at several wavelengths and the most favorable condition for such heterostructures as for optical sensors area was determined in so-called arbitrary coordinates "light wavelength of probing light beam – its angle of incidence on the heterostructure". The spectral interval from 590 to 675 nm as well as an interval for angles of light incidence on the heterostructures from 45° to 50° are the most effective for an application of such heterostructure as optical sensors in plasmonics.

Key Words: reflectometry, p-polarized light, multi-angular spectro-ellipsometry, plasmon excitation, copper, graphene.

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

Вступ

Найчастіше металевими складовими сенсорних плівкових систем слугують елементи, які замикають 3d-, 4d- і 5d-ряди, тобто Cu, Ag і Au [1]. Та і серед цих металів перевагу в більшості випадків надають золоту [2]. Проте,

показано [1], що не менш ефективними є сенсори, одним із шарів яких є мідь. Недоліком при виборі цього матеріалу є його окислення в умовах повітряної атмосфери. Але при нанесенні шару діелектрика на тонку плівку такого металу можна захистити її як від окислення, так і від корозії, і тим самим подовжити термін

ефективного функціонування сенсора. Невиясненим до цього часу залишається питання про те, чи стане нанесення додаткового тонкого шару з іншого провідного матеріалу, більш стійкого до окислення в повітряній атмосфері, над такою діелектричною плівкою ефективним засобом для підвищення чутливості сенсора шляхом зміни його оптичних характеристик умовами нанесення додаткової поверхневої плівки. В якості матеріалу такого додаткового шару міг би слугувати графен.

Графен як двовимірний кристалічний аналог вуглецю є перспективним матеріалом у плазмоніці та нанoeлектроніці. Відомо [3], що унікальна атомна структура графена призводить до рекордних значень гнучкості, механічної міцності та специфічних оптичних властивостей, що відкриває нові можливості у виробництві електронних та оптичних систем. Серед широкого спектру потенційних застосувань графена, починаючи від транзисторів та хімічних сенсорів до нанoeлектро-механічних пристроїв і композитів, оптоелектроніка і плазмоніка є одними з найбільш перспективних галузей його використання [3]. Самі по собі моношари графену демонструють унікальні властивості завдяки сильній взаємодії π -електронів вздовж всієї кристалічної ґратки у двовірній структурі. Ці унікальні властивості дозволяють використовувати графен у якості основного матеріалу в різних нанорозмірних пристроях [3]. Тому слід очікувати, що захищена шаром графена поверхня мідної плівки може стати придатною альтернативою такому широковживаному в плазмоніці матеріалу як золото у практичних застосуваннях. Згадана гетероструктура є відносно дешевою, хімічно стійкою, відтворюваною за своїми оптичними властивостями і уявляє собою високоякісний плазмонний матеріал, який до того ж у технологічному відношенні легко піддається нанoобробці [1]. Більше того, плівки міді, захищені оксидом HfO_2 , також забезпечать можливість практичного використання із-за низьких витрат більш дорогих інших благородних металів в системах реєстрації плазмонного відгуку на електромагнітне збудження. Ось чому головна мета роботи полягатиме в оцінці рівня такого відгуку, що підтримується плазмонами саме в такій гетероструктурі з базовим мідним шаром.

Експериментальна частина

В якості зразків були вибрані тонкі плівки хімічно чистих міді, срібла і золота, осаджених

на тонкий буферний шар хрому товщиною $d=1,5$ і 2 нм, які було нанесено CVD методом на кварцову підкладку, а саме осажені цим методом гетероструктури: $\text{Cr}(2\text{nm})\text{-Cu}(37\text{nm})$ – зразок 1, $\text{Cr}(2\text{nm})\text{-Ag}(53\text{nm})$ – зразок 2, $\text{Cr}(2\text{nm})\text{-Au}(47\text{nm})$ – зразок 3, $\text{Cr}(1,5\text{nm})\text{-Cu}(43,5\text{nm})$ – зразок 4, $\text{Cr}(1,5\text{nm})\text{-HfO}_2(7\text{nm})$ – зразок 5, як і інший їх ряд: $\text{Cr}(1,5\text{nm})\text{-Cu}(43,5\text{nm})$ – графен – зразок 6, $\text{Cr}(1,5\text{nm})\text{-Cu}(43,5\text{nm})\text{-HfO}_2(7\text{nm})$ – зразок 7, $\text{Cr}(1,5\text{nm})\text{-Cu}(43,5\text{nm})\text{-HfO}_2(7\text{nm})$ – графен – зразок 8.

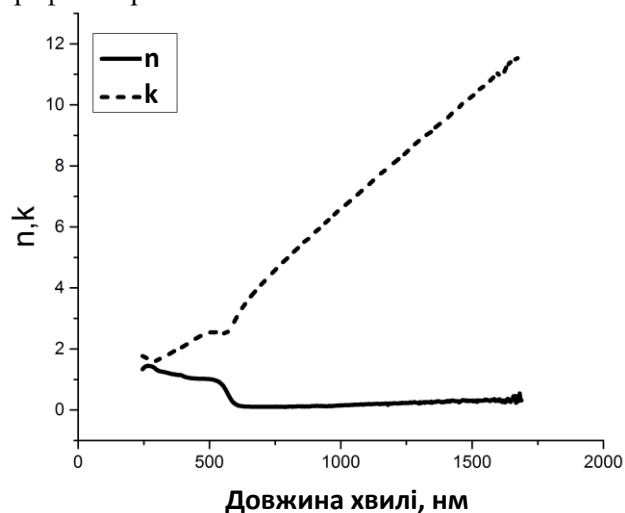


Рис. 1. Залежність показників заломлення n та поглинання k від довжини хвилі (нм) для мідної плівки (зразок 1).

Оптична діагностика зразків проведена методами багатокутової спектроскопії та рефлектометрії у р-поляризованому світлі [4].

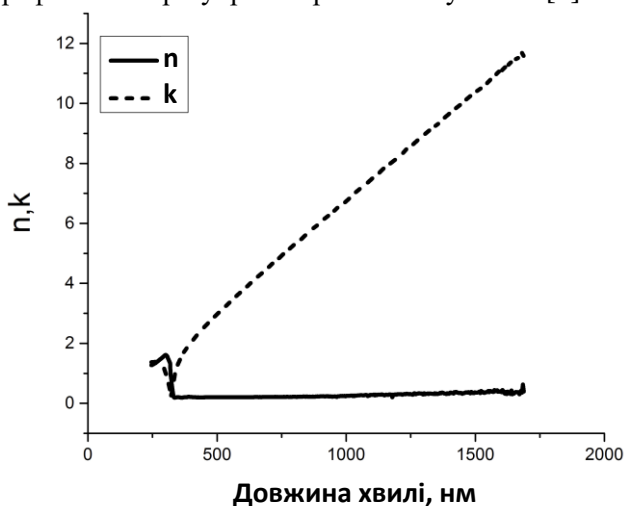


Рис. 2. Залежність показників заломлення n та поглинання k від довжини хвилі (нм) для срібної плівки (зразок 2).

Для таких металевих складових з 3d-, 4d- і 5d-рядів таблиці Менделєєва як Cu, Ag та Au відповідно, на рисунках 1-3 проведено порівняння отриманих в наближенні напів-

нескінченного середовища спектрів оптичних сталих – показників заломлення n і поглинання k для зразків 1-3. Такі тонкі металеві покриття утворюють стійку основу для чутливих сенсорів у вигляді плівкових систем при збудженні в них плазмонного резонансу. Ефективність і чутливість сенсорів, що діють на основі ефекту плазмонного збудження, залежить не тільки від вибору матеріалу і товщини його шару для створення тонко-плівкової системи з оптимальними складом і розмірами, а і від спектрально-кутових оптичних характеристик в умовах їх функціонування.

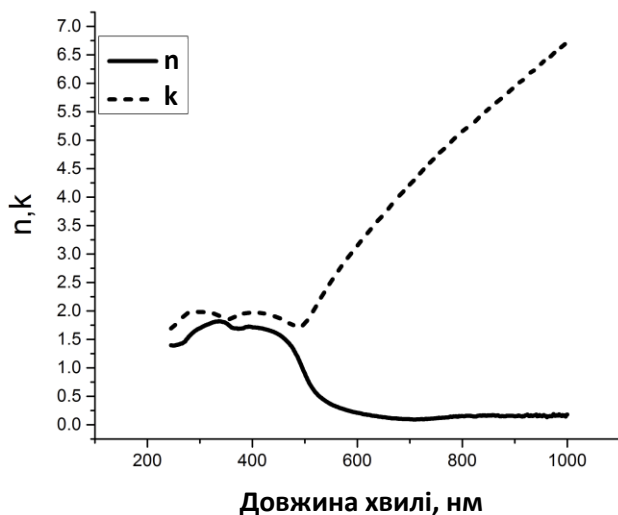


Рис. 3. Залежність показників заломлення n та поглинання k від довжини хвилі (нм) для золотої плівки (зразок 3).

Саме для гетероструктури з мідним шаром помітно (рис. 1), що залежність $n(\lambda)$ при зростанні довжини хвилі λ на краю міжзонного поглинання спадає не так різко. З цієї причини слід очікувати, що наявна особливість поглинання світла електронною підсистемою Cu в певній мірі впливатиме і на перебіг плазмонного збудження у видимій області спектра. Якщо детальніше порівняти відомі результати [2] і отримані нами дані поблизу краю міжзонного поглинання міді з оптичними властивостями тонких плівок Ag (рис. 2) і Au (рис. 3), то із-за помітної подібності їхніх оптичних спектрів, як це було підкреслено в роботі [5], вибір міді в якості базового матеріалу не є безпідставним.

На рис.4 для спостереження змін в спектрах оптичних сталих n і k при переході від мідної плівкової структури (зразок 4, в якому товщина $d=43,5$ нм шару міді більша, ніж у зразка 1) до масивного матеріалу проведено порівняння наших даних для цього зразка і результатів роботи [2]. Видно, що у мідної плівки по відношенню до масивної міді абсолютні значення показника заломлення занижені, а показника

поглинання завищені у дослідженому спектральному інтервалі

Надалі одним із завдань роботи було з'ясування, як впливатиме за умови вибору міді як основного матеріалу з певною його товщиною у складі гетероструктури притаманна їй провідність на ефективність плазмонного збудження в системі, верхнім шаром якої слугуватиме ще і вуглецевий моношар (графен), осаджений до того ж на шар оксиду гафнію. Спектр оптичних сталей такого оксиду (зразок 5) представлено на рис. 5. Цей оксидний шар, в свою чергу, покриває тонку мідну плівку і не дозволяє їй підлягати окисленню в повітряній атмосфері. Утворена таким засобом плівкова

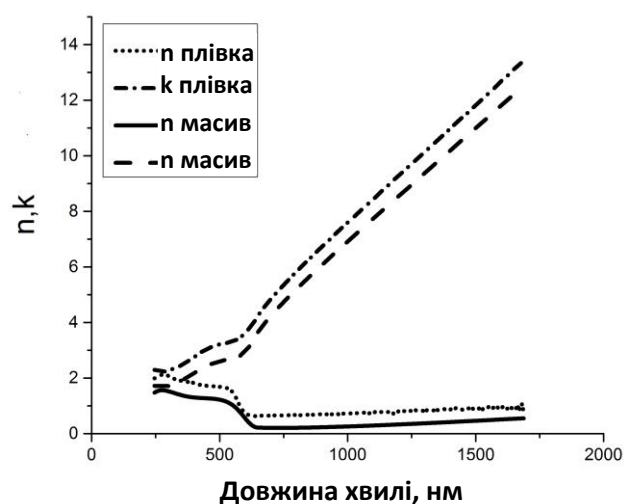


Рис. 4. Порівняння залежностей показників заломлення n та поглинання k від довжини хвилі (нм) для мідної плівки товщиною 43,5 нм (зразок 4) і масивного зразка за даними роботи [2]. Криві для плівки зміщені на 0,5 по вертикалі вгору.

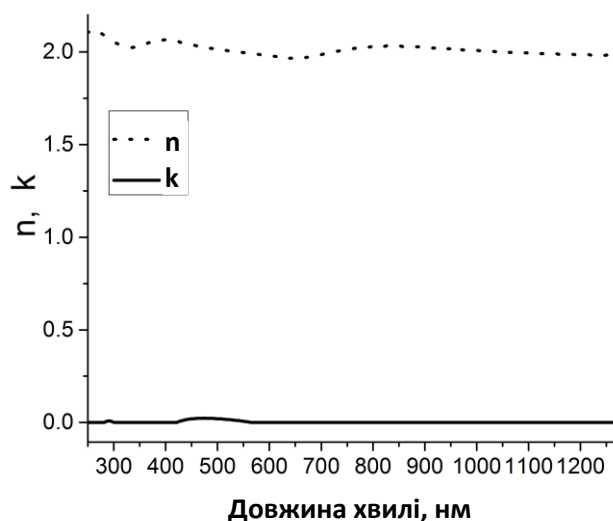


Рис. 5. Залежність показників заломлення n та поглинання k від довжини хвилі (нм) для оксиду гафнія (зразок 5).

система «скляна основа - буферний металевий шар – тонка мідна плівка – діелектричний шар - графен» зможе мати суттєві переваги по відношенню до стандартної золотої плівки під час функціонування у складі сенсора, створеного на таких технологічних засадах.

Спочатку було виготовлено гетероструктури із зазначеною вище послідовністю шарів з різними

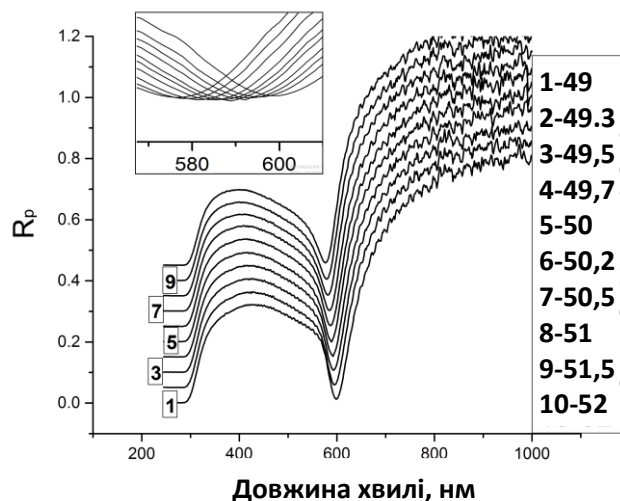


Рис. 6. Залежності коефіцієнта відбиття р-поляризованого світла від довжини хвилі (нм) для зразка 4 з базовим металевим шаром міді без осадженого на його поверхню графена для різних кутів падіння в інтервалі від 49° до 52° . Кр. 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 зміщені по вертикалі вгору на 0,05, 0,10, 0,15, 0,20, 0,25, 0,30, 0,35, 0,40, 0,45 відповідно. На вставці виділено фрагмент щодо поведінки мінімумів спектральних залежностей без додаткового зсуву кривих по вертикалі.

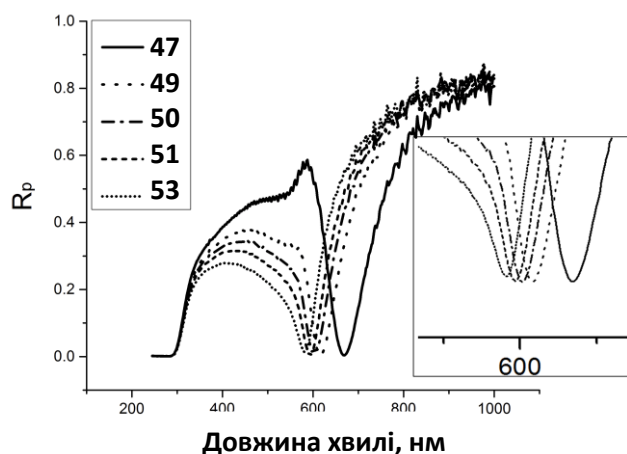


Рис. 7. Залежності коефіцієнта відбиття від довжини хвилі (нм) для зразка 6 з базовим металевим шаром міді і осадженим на ньому графеном для різних кутів падіння в інтервалі від 47° до 53° . На вставці виділено фрагмент щодо поведінки мінімумів цих залежностей.

товщинами шару ($d=37$ і $43,5$ нм) базового металу (міді) в них і проведено між ними порівняння результатів стосовно його оптичного відгуку при плазмонному збудженні в зразках 3 і 4 ще за відсутності графенового покриття.

Основою експерименту стала оптична діагностика плазмонного ефекту шляхом використання явища відбивання р-поляризованого світла від сформованої гетероструктури із плазмонним збудженням та багатокутової спектроскопії з можливістю визначення 2-х параметрів: азимута відновленої лінійної поляризації Ψ і зсуву фаз Δ між ортогональними компонентами вектора поляризації.

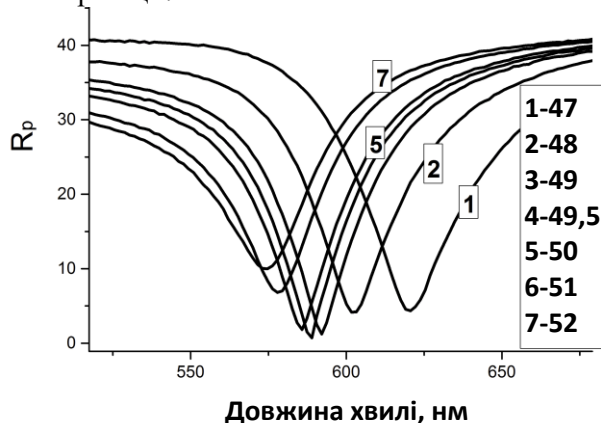


Рис. 8. Залежності еліпсометричного параметра Ψ від довжини хвилі (нм) для зразка 4 з базовим металевим шаром міді для різних кутів падіння в інтервалі від 47° до 52° .

З такого типу проведених нами експериментів було не тільки зафіксовано сам ефект плазмонного збудження в гетероструктурах, але за його кутовою і спектральною поведінками визначено умови найефективнішого його прояву шляхом аналізу відповідних залежностей оптичних характеристик за методиками робіт [6,7]. На рисунках 6 і 7 надано спектри коефіцієнта відбиття $R_p(\lambda)$ в р-поляризованому світлі для зразків 4 і 6, отримані методом Кретчмана-Петера в ATR-геометрії (порушеного повного внутрішнього відбиття) при кутах падіння від 49° до 52° . Такі залежності $R_p(\lambda)$ характеризують плазмонний відгук згідно з висновками роботи [7] стосовно пояснення походження глибокого мінімуму, що спостерігається на відповідних кривих, і дають можливість знайти своєрідний оптимум для плазмонного збудження в координатах (λ, φ) в гетероструктурі з базовим металевим шаром Cu без нанесення графену (рис. 6) і з тим шаром Cu, який покритий графеном (рис. 7).

Цікаво було порівняти результати рефлектометрії в р-поляризованому світлі з даними багато-кутової спектроеліпсометрії по параметру Ψ за методикою роботи [8].

Тому прояв ефекту плазмонного збудження по параметру Ψ в метало-діелектричній гетероструктурі спостережено для зразка 4 без нанесення на нього ні графена в якості самого верхнього шару, ні самої плівки HfO_2 під ним (рис.8). Аналогічну залежність, яка характеризує плазмонний відгук електронної підсистеми гетероструктури (зразок 6), отримано і для захищеної графеном мідної плівки (рис.9).

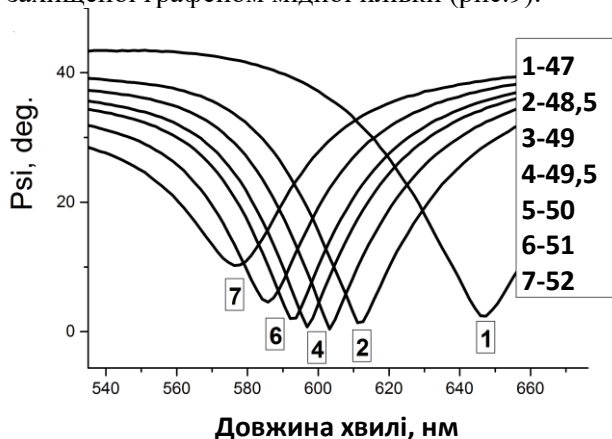


Рис. 9. Залежності еліпсометричного параметра Ψ від довжини хвилі (нм) для зразка 6 з базовим металевим шаром міді та моношаром графену на його поверхні для різних кутів падіння в інтервалі від 47° до 52° .

З рис. 6 і рис. 7 видно, як помітно розширюється діапазон довжин хвиль, де залежність $R_p(\lambda)$ сягає мінімуму [7]. Це надає більші можливості щодо використання такого типу гетероструктури (з нанесеним графеном) в якості сенсора в плазмонних пристроях, де в процесі діагностики робочою довжиною хвилі світла може бути та, що притаманна певному світлодіоду чи напівпровідниковому лазерному джерелу в таких пристроях [8].

Слід зазначити, що мінімальне значення параметра Ψ на рисунках 8 і 9 досягається при довжинах хвиль світла 589 і 602 нм відповідно, які попадають в робочий інтервал довжин хвиль, що використовують в нашому рефлектометричному експерименті в р-поляризованому світлі для плазмонного збудження [8,9].

Порівняння результатів (рисунки 6 і 8) нашого експерименту (наявність типової системи різних мінімумів на кривих при різних кутах падіння поляризованого світла) та даних стосовно оптики як тонких плівок Cu , чи Ag , чи Au , так і масивних їхніх аналогів [4] (наприклад

для Cu на рис. 4) впевнено переконує в можливості використання міді в якості базового матеріалу для гетероструктури при створенні сенсора з плазмонним збудженням. Це означає, що гетероструктури з тонкими плівками Cu є ефективні для використання в сенсорах, які матимуть певну оптимальну товщину при функціонуванні в умовах збудження в них плазмонного резонансу в деякому інтервалі кутів падіння р-поляризованого світла.

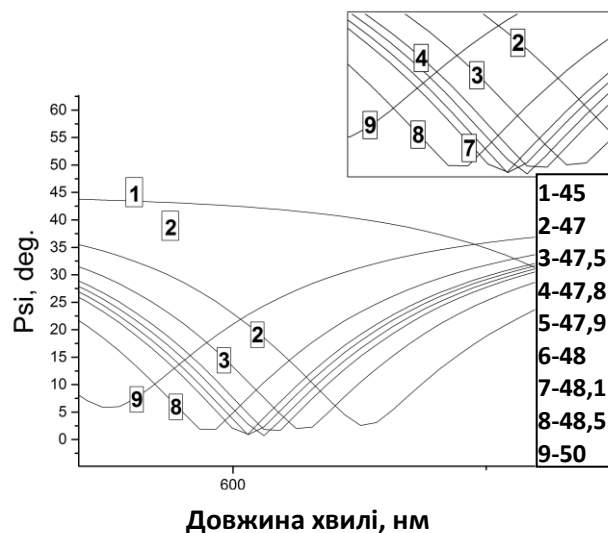


Рис. 10. Залежності еліпсометричного параметра Ψ від довжини хвилі (нм) для зразка 7 з базовим металевим шаром міді і шаром оксиду гафнію на його поверхні для різних кутів падіння в інтервалі від 45° до 50° . На вставці виділено фрагмент щодо мінімумів цих залежностей.

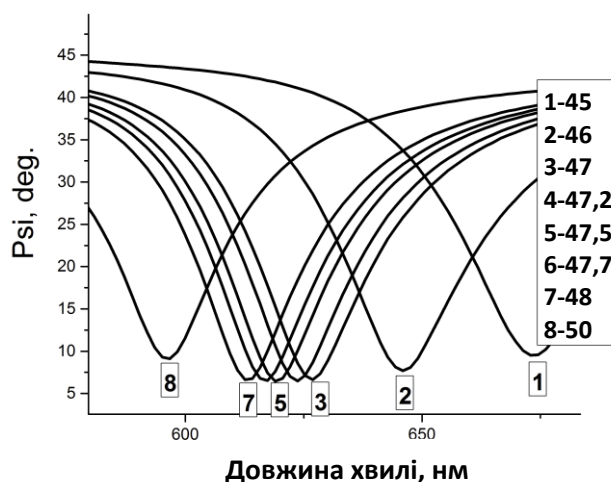


Рис. 11. Залежності еліпсометричного параметра Ψ від довжини хвилі (нм) для зразка 8 з базовим металевим шаром міді і з шаром оксиду гафнію та моношаром графену на його поверхні для різних кутів падіння в інтервалі від 45° до 50° .

Однак добре відомим недоліком використання Cu є його окислення в повітряній атмосфері. Цього можна уникнути, створивши метало-діелектричну систему, а саме, покрити тонку плівку міді оксидом HfO_2 [6]. На рис. 5. представлено, якими оптичними властивостями володіє цей шар в видимій області.

Тому краще б було перевірити, чи не погіршиться ефект плазмонного збудження в гетероструктурі з таким оксидом, а потім на її зовнішню поверхню нанести ще і шар графену. Для цього важливо було порівняти для двох зразків, один з яких є гетероструктурою з мідним шаром і осадженою на ньому плівкою оксиду HfO_2 (зразок 7), а інший – наноструктурованою системою, що складається з плівок хрому, міді, оксиду гафнію і графенового покриття (зразок 8), спектри еліпсометричного параметра $\Psi(\lambda)$, які представлені на рис. 10 і 11 відповідно. З цих рисунків видно, що формування оксидо-мідної плівки і осадження на неї шару графену (зразок 8) дещо розширює інтервал тих значень λ та кутів ϕ падіння світла на плівку, в межах яких мінімізується еліпсометричний параметр Ψ і певним чином зростає плазмонне збудження. Це означає, що чутливість сенсора, створеного на

основі останнього із зазначених гетероструктур (зразок 8) суттєво зростає як по можливості вибору λ , так і кута падіння ϕ , тобто оптимум для плазмонного ефекту із своєрідної щільної області значень цієї пари величин перетворюється в більш розширену форму в координатах (λ, ϕ) .

Висновки

Завдяки поляризаційним рефлектиметричним і багатокутовим спектроеліпсометричним дослідженням встановлено, що в гетероструктурах типу Cr-Cu-HfO_2 -графен завдяки нанесенню графену відбувається розширення спектральної області, де спостерігаються різкі мінімуми плазмонного збудження, положення яких залежить від довжини хвилі падаючого під певним кутом р-поляризованого світла та товщини функціонального мідного шару. Оптимальними для ефективного використання таких гетероструктур в якості оптичних сенсорів є спектральний діапазон 590-675 нм та інтервал кутів падіння від 45° до 50° .

Список використаних джерел

1. Плазмоніка міді та срібла з графеновим покриттям / [В. Г. Кравець, Р. Джеліл, І. Д. Кім та ін.]. // Scientific Reports volume 4. – 2014. – №5517.
2. Палік Е. Д. Довідник з оптичних констант твердих тіл / Е. Д. Палік., 1998. – 1088 с.
3. Спектроскопічна еліпсометрія графену та екситон-зміщеного піку ван Хова у поглинанні / [В. Г. Кравець, А. Н. Григоренко, Р. Р. Нейр та ін.]. // PHYSICAL REVIEW B. – 2010. – №155413.
4. Діагностика поверхні поляризованим світлом / Л. В. Поперенко, В. С. Стащук, І. А. Шайкевич, В. А. Одарич. – Київ: ВПЦ: «Київський університет», 2007. – 336 с.
5. Вард Л. Оптичні константи об'ємних матеріалів та плівок / Л. Вард. – Брістоль: Institute of Physics Bristol, 1988. – 291 с.
6. Сильний зв'язок дифракційно зв'язаних плазмонів та оптичних хвильоводних мод в смугах діелектричних наноструктурах золота на довжинах хвиль телекомунікації / П. А. Томас, Г. Х. Аутон, Д. Кундіс, та ін. // Sci Rep. – 2017. – №45196.
7. Петер Х. Збудження плазмонів та міжзонних переходів електронами / Х. Петер. – Берлін, 1980. – 196 с.
8. Леттінгтон Е. А. Тонкоплівний діамант / Е. А. Леттінгтон, Д. В. Стідс. – Лондон: Chapman and Hall, 1994. – 155 с.
9. Оптика металевих структур / Л. В. Поперенко, Ю. В. Кудрявцев, В. С. Стащук, Я. П. Лі. – Київ: ВПЦ «Київський університет», 2013. – 531 с.

References

1. V. G. KRAVETS, R. JALIL, Y.-J. KIM and others (2014) Graphene-protected copper and silver plasmonics, *Scientific Reports*. 4, 5517.
2. E. D. PALIK, (1998) *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press.
3. KRAVETS, V. G., GRIGORENKO, A. N., NAIR, R. R. and others (2010) Spectroscopic ellipsometry of graphene and an exciton-shifted van Hove peak in absorption, *Physical review B* 81, p. 155413.
4. POPERENKO, L.V. et al. (2007) *The diagnostics of surface by the polarized light*. Kyiv:VPC: «Kyiv university».
5. L. WARD, (1988) *The optical properties of bulk materials and films*. Institute of Physics, Bristol.
6. P. A. THOMAS, G. H. AUTON, D. KUNDYS and others, (2017), *Strong coupling of diffraction coupled plasmons and optical waveguide modes in gold stripe-dielectric nanostructures at telecom wavelengths.*, *Sci Rep*. 7: 45196.
7. H. RAETHER, (1980) *Excitation of Plasmons and interband transitions by Electrons*. Berlin
8. E. A. LETTINGTON, J.W. STEEDS, (1994) *Thin Film Diamond*. Chapman and Hall, London.
9. L.V. POPERENKO et al. (2013) *The optics of metal structures*. Kyiv:VPC: «Kyiv university».

Надійшла до редколегії 10.03.18

УДК 519.9

Терент'єва Ю.Г.¹, к.ф.-м.н., доц..
Сніцєрова О.М.², асп.

Y.G. Terent'yeva¹, PhD.,
O.M. Snitserova², PhD stud.

Високотемпературна флуоресценція аденозину

Room temperature fluorescence of adenosin

^{1,2}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: juliaTer@i.ua

^{1,2}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: juliaTer@i.ua

Записано спектри поглинання водного розчину аденозин-5'-монофосфату (АМФ) та аденозин-трифосфату (АТФ) в діапазоні 200-400 нм. Отримано спектри флуоресценції АТФ та АМФ при кімнатній температурі для різних концентрацій їх водних розчинів. Виявлено, що така флуоресценція аденозинів виникає при високій концентрації розчину ($C=2 \cdot 10^{-2}$ М) та має максимум λ_{max} в області 410 нм. Запропоновано пояснення механізму високотемпературної флуоресценції, який полягає в формуванні аденін-аденінових ексимерів.

Ключові слова: флуоресценція, аденозин-5'-монофосфату, АТФ, ексимер

We registered the room temperature fluorescence of high concentration ($C \geq 10^{-2}$ M) of adenosine-5'-monophosphate (AMP) water solution with λ_{max} in region from 404 to 412 nm. In our opinion, the appearance of high-temperature fluorescence is associated with the formation of excimer pairs. Unlike dimers, the excimer does not create an additional band in adenosine absorption spectrum, which is confirmed by our data. The fluorescence from the deactivation of the excimer pair is excited by a continuous spectrum in a wide range, in our case, up to 350 nm. Absorption by free molecules of adenine dramatically weakens the incident flow, creating "failures" in the fluorescence excitation spectrum, which coincide with the adenine absorption bands. According to our results, the excimers creation is a threshold of concentration. According to literary data, adenine π -electronic systems in the excimer are seems to be a sandwich-like orientation with an extremely small distance of 2 Å. Therefore, during an active irradiation in the case of deactivation of the excimer adenine molecules do not have time to move away and the excimer is formed again.

Key Words: fluorescence, adenosine-5'-monophosphate, ATP, excimer

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Вступ

Протягом останніх півтора десяти років з'явилися публікації, в яких димеризація аденіна докладно вивчалась як з експериментальної так і теоретико-розрахункової позиції. Розглядаються різні умови виникнення димерів – як у водному розчині так і у більш екзотичних системах. Наприклад, в роботі [1] аналізується стійкість двовимірних молекулярних ланцюгів, утворених при адсорбції аденіну на високоорієнтовану піролітичну графітову (НОРГ) поверхню. Виявилось, що процес самоутворення стабільних двовимірних аденінових моношарів зумовлений утворенням сильних водневих аденін-аденінових зв'язків. Ці зв'язки, власне, є відповідальними за утворення ДНК-пар в живих об'єктах і, таким чином, можуть з'єднувати також і окремі молекули АМФ у водному розчині у ди- або тримери.

Загальновідомим є факт, що водні розчини аденозинів (АМФ, АДФ, АТФ) не флуоресціюють при кімнатній температурі, хоча при низьких температурах їх флуоресценція має доволі великий квантовий вихід. Однак, в роботі [2] було вперше зафіксовано флуоресценцію водного

розчину АМФ при кімнатній температурі. Автори вважають, що джерелом такої флуоресценції слід вважати присутні в розчині достатньо стабільні аденінові димери. Нами експериментально була виявлена високотемпературна флуоресценція водних розчинів аденозинів з надзвичайно високим квантовим виходом, яка, однак, на наш погляд, має іншу природу.

Обладнання і матеріали

В якості досліджуваного матеріалу використувався 1) хімічно чистий порошок динатрієвої солі 5'-аденозин монофосфату, який розводили в бідистильованій воді, 2) водний розчин натрію аденозинтрифосфату в стандартній аптечній концентрації (10 мг/мл). Для запису спектрів поглинання водних розчинів АМФ та АТФ використувався серійний двопроменевий спектрофотометр Specord UV-VIS. Запис проводився в стандартних кварцевих кюветах товщиною 5 см, 1 см та 1 мм (діапазон пропускання 170-1000 нм). Спектри флуоресценції при кімнатній температурі записувались на спектрофлюориметрі Cary Eclipse (Varian Inc., Agilent Tech.); використовували стандартні кварцові кювети розміром 1×1 см.

Експериментальні результати та їх аналіз

Було приготовлено дві групи зразків, Г1 та Г2, водні розчини АМФ різної концентрації в діапазоні $C=10^{-4}$ - 10^{-1} М, третя, Г3, аналогічно, водні розчини АТФ. Технологія приготування зразків групи Г1 полягала в розчиненні для кожного зразка у воді каліброваної кількості порошку АМФ. Технологія приготування зразків іншої групи (Г2) полягала в послідовному розведенні базового висококонцентрованого ($C=10^{-1}$ М) зразка 1:10 до зменшення стартової концентрації в 10^5 разів. Третя група (Г3) представляла собою також набір зразків розведених водою в пропорції 1:10, 1:100, 1:1000, 1:10000 з базового аптечного розчину АТФ. Для усіх зразків було записано спектри поглинання, які для усіх концентрацій виявились типовими. Унормований спектр поглинання представлений на рис.1 (кр. 1) містить дві смуги поглинання, з максимумами при 260 та 212 нм, які відносяться, відповідно, до першого та другого електронних переходів аденинової π -електронної системи. Для усіх зразків при кімнатній температурі в режимі флюоресценції були записані спектри випромінювання. Для зразків АМФ групи Г1 з концентраціями $C=2 \cdot 10^{-2}$ М і більше було виявлено низькотемпературну флюоресценцію. При менших концентраціях свічення не зафіксовано. Для зразків груп Г2 та Г3 аутофлюоресценція АМФ та АТФ була виявлена в усіх зразках, причому її інтенсивність зменшувалась із зменшенням у зразку концентрації АМФ і виходила на рівень шумів при розведенні стартового розчину в 10000 разів. На нашу думку поява високотемпературної флюоресценції пов'язана з утворенням ексимерних (ексиплексних) пар. На відміну від димерів, ексимери не створюють в спектрі додаткової смуги поглинання, що підтверджується на-

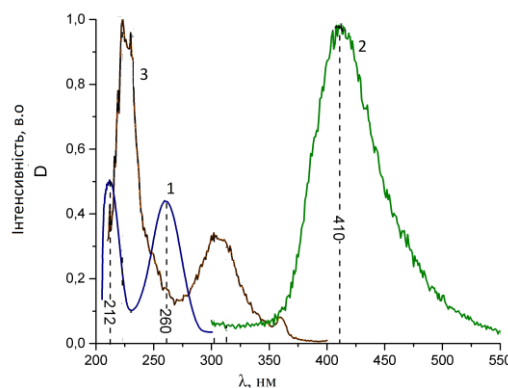


Рис. 1. Унормовані спектр поглинання (кр. 1), флюоресценції (кр. 2) та збудження флюоресценції (кр. 3) АМФ при $T=293$ К.

шими даними. Флюоресценція від деактивації ексимерної пари збуджується неперервним спектром в широкому діапазоні, в нашому випадку до 350 нм. Поглинання вільними молекулами аденіна драматично ослаблює падаючий потік, створюючи «провали» у спектрі збудження флюоресценції, які співпадають зі смугами поглинання аденіна. Створення ексимерів, згідно з нашими результатами, носить пороговий характер по концентрації. Крім того, згідно розрахунків [3] аденинові π -електронні системи в ексимері мають швидше за все сандвіч-орієнтацію із надзвичайно малою відстанню – $2\text{\AA}$. Тому під час активного опромінення в разі деактивації ексимера молекули аденіна не встигають віддалитись і ексимер утворюється знову.

Висновки

Зареєстрована високотемпературна флюоресценція водних розчинів аденозинів з високим квантовим виходом, що виникає при високих концентраціях, надано пояснення її механізму.

References

1. Bald I. Two-dimensional network stability of nucleobases and amino acids on graphite under ambient conditions: adenine, L-serine and L-tyrosine/ Ilko Bald, Sigrid Weigelt, Xiaojing Ma, Pengyang Xie, Ramesh Subramani, Mingdong Dong, Chen Wang, Wael Mamdouh, Jianguo Wang and Flemming Besenbacher// *Phys. Chem. Chem. Phys.* PCCP, - 2010.-Vol.12.- №14.- pp. 3616–3621.
2. Kononov A. Luminescence excitation spectra reveal low-lying excited states in stacked adenine bases/ A. I. Kononov and M. N. Bukina // *J Biomol Struct Dyn*, -2002.-Vol. 20.- № 3.- pp. 465–471
3. Plasser F. Electronic excitation and structural relaxation of the adenine dinucleotide in gas phase and solution/ Felix Plasser, Hans Lischka// *Photochem. Photobiol. Sci.*, -2013.-Vol.12. -pp.1440-1452.
1. ILKO BALD, SIGRID WEIGELT, XIAOJING MA, PENGYANG XIE, et al. (2010) Two-dimensional network stability of nucleobases and amino acids on graphite under ambient conditions: adenine, L-serine and L-tyrosine. *Phys. Chem. Chem. Phys. PCCP* .12(14). p. 3616–3621.
2. A. I. KONONOV AND M. N. BUKINA (2002) Luminescence excitation spectra reveal low-lying excited states in stacked adenine bases. *J Biomol Struct Dyn*. 20(3). p. 465–471.
3. FELIX PLASSER, HANS LISCHKA (2013) Electronic excitation and structural relaxation of the adenine dinucleotide in gas phase and solution. *Photochem. Photobiol. Sci.* 12. p.1440-1452.

Надійшла до редколегії 22.02.2018

УДК 535.247; 621.375.024; 621.317.7

Ямпольський А.Л.¹, асп.,
Макаренко О.В.¹, к.ф.-м.н., доц.,
Шарапа А.І.¹, інж.

Фотодіодний приймальний модуль з цифровим перемиканням діапазонів

¹Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13
e-mail: almarkar@univ.kiev.ua

A.L. Yampolskiy¹, PhD stud.,
O.V. Makarenko¹, PhD.,
A.I. Sharapa¹, Eng.

Photodiode receiver module with digital gain control

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13
e-mail: almarkar@univ.kiev.ua

Розроблено трансімпедансний підсилювач постійного струму для фотодіода, величина підсилення задається зовнішніми управляючими TTL-сигналами і може змінюватися на 5 порядків. Приділено увагу питанням завадостійкості вимірювальної апаратури. Описуваний прилад дозволяє вимірювати потоки оптичного випромінювання, величина яких змінюється в динамічному діапазоні 96 дБ і може бути застосований для автоматизованих фізичних експериментів у фотометрії, спектроскопії, еліпсометрії, тощо.

Ключові слова: фотодіод, перетворювач струм-напруга, цифрове управління.

In this paper, a photodiode transimpedance amplifier with a controlled gain based on PGA103 chips was developed. To avoid distortion of the signal and to reduce the measurement error operational amplifier AD711 with low bias and leakage current was used. The scheme is very sensitive to internal mutual interference, is inclined to self-excitation and requires special arrangement and careful shielding. Therefore, appropriate circuitry solutions were adopted, such as separate cascade power supply, signal filtering, special stabilization of reference voltages, buffering of the control inputs of the amplifier. The device has three cascades: the first is a current-voltage converter with a conversion factor of 40 mV/nA, the next two are voltage amplifiers. Digital inputs allow you to set the total gain from x1 to x10000 (5 ranges). The device designed showed good linearity (nonlinearity of the response is 1.3% with an amplification of x10000, and in the remaining ranges it does not exceed 0.5%). Compensation of zero shifts by trimmer resistors is not fully achieved; it must also be done programmatically at the stage of processing the measured signal. For each range, the zero offset is different. The frequency range of the amplifier is from 0 to 85 Hz, this allows, if necessary, to modulate the optical radiation at a small frequency. The described photodetector module can be used in physical experiments, metrology or industrial tasks that require measuring light fluxes in a wide dynamic range.

Key words: photodiode, transimpedance amplifier, current-voltage converter, digital gain control.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Вступ

Вимірювання світлових потоків є актуальним завданням у багатьох галузях науки і техніки. Оптичне випромінювання несе в собі інформацію про середовище, яке його породило (зірка, розжарена деталь, люмінофор, тощо), або речовину чи об'єкт, із яким воно взаємодіяло (наприклад, відбилося від поверхні напівпровідника, тонкоплівкової структури, пройшло крізь розчин, розсіялось на частинках речовини або неоднорідностях середовища). Інформація може міститись у амплітуді, фазі та

поляризації світлової хвилі. Процедура вимірювання дозволяє виділити цю інформацію із світлового потоку і використати її для фізичних досліджень чи, скажімо, для управління технологічним процесом.

Технічна задача авторів (гоніополяриметрія розсіяного світла) передбачала вимірювання оптичних потоків, величина яких змінюється на кілька порядків і може наближатися до рівня, не набагато більшого за поріг чутливості людського ока. З огляду на особливості експериментальної установки та з міркувань стабільності приймача було вирішено відмовитися від типового підходу

використання фотоелектронного помножувача, а натомість застосувати систему реєстрації світлових потоків на основі фотодіода.

Згідно з [1], фотодіоди, будучи увімкнені в схему з операційним підсилювачем, дозволяють охопити сигнали, амплітуди яких лежать в межах 5 порядків.

У [2] теоретично показано, що динамічний діапазон фотодіода може сягати ~ 100 дБ (отримано з шумових характеристик фотодіода за ідеальних умов). Реально він був на 2 порядки менше внаслідок деградації фотодіодного масиву з часом. Але дана робота присвячена випробуванню нового експериментального типу діодів, технологія виготовлення яких ще не була відпрацьована, тому фотодіоди, що серійно випускаються промисловістю, повинні мати кращі характеристики.

Фотогальванічний режим короткого замикання фотодіода має ряд переваг [3]: не треба джерела напруги зміщення, відсутній темновий струм фотодіода, лінійна енергетична характеристика. Тому для розроблюваного підсилювача ми обрали саме цей режим роботи.

Великий власний коефіцієнт підсилення операційного підсилювача призводить до того, що його інвертуючий вхід є віртуальною землею. Така схема добре підходить для вимірювання струмів від десятків міліампер до часток пікоампера [4]. Максимальний струм обмежується вихідним струмом операційного підсилювача.

Нижня межа вимірюваного струму визначається вхідною наругою зміщення, вхідними струмами зміщення ОП та їх дрейфами. Вхідна шумова наруга операційного підсилювача передається на вихід з низьким коефіцієнтом підсилення $A = 1 + R_{33} R_D$ (для постійного струму) за рахунок великого опору діода R_D . Але ємність діода C_D модифікує зворотний зв'язок на високих частотах, додаючи підсилення. Враховуючи значні величини R_D та C_D , ефект може проявлятися вже на досить низьких частотах [5].

Великий вхідний опір призводить до утворення різких піків на передаточній характеристиці і навіть до самозбудження підсилювача [5,6]. В загальному випадку це явище усувають, вмикаючи паралельно R_{33} невеликий конденсатор (одиниці-десятки пФ). Часто достатньо буває паразитної ємності монтажу. Але слід пам'ятати, що при такій компенсації суттєво звужується смуга робочих частот трансімпедансного підсилювача.

Враховуючи необхідність забезпечення високого коефіцієнта підсилення схеми і вищеописані особливості перетворювача струм-напруга, автори прийняли рішення звужити смугу його пропускання до < 100 Гц. Таким чином, метою даної роботи є розробка і побудова трансімпедансного підсилювача постійного струму для фотодіода з можливістю програмно змінювати коефіцієнт підсилення в межах кількох порядків.

Конструкція підсилювача

В якості приймача був обраний фотодіод ФД-288Б, в першу чергу, завдяки своїм розмірам (діаметр чутливої площадки 11,3 мм). Спектральний діапазон у нього $\Delta\lambda = 0,3 \dots 1,1$ мкм, інтегральна струмова чутливість 0,24 А/Вт, максимум спектральної чутливості припадає на $\lambda_{max} = 0,81$ мкм [7] – такі параметри цілком задовольняють вимогам експериментальної установки.

Схема фотоприймального модуля містить три каскади. Перший – це перетворювач струм-напруга, побудований на прецизійному операційному підсилювачі AD711 (рис. 1). Резистор R_5 дозволяє зміщувати вихідну наругу каскаду в межах кількох мілівольт. Ланцюжок зворотного зв'язку містить 4 SMD-резистори типорозміру 1206, опором по 10 МОм кожен. Такі резистори були обрані через їх відносно невелику температурну нестабільність. Частота зрізу каскаду визначається опором та ємністю ланки зворотного зв'язку і складає 85 Гц.

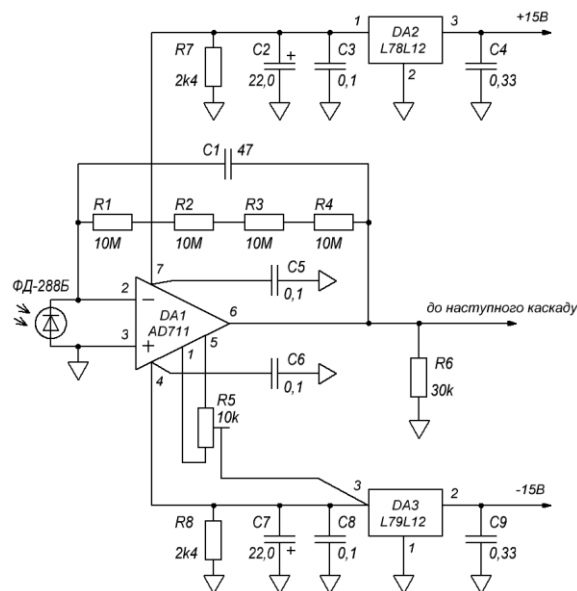


Рис. 1. Схема перетворювача струм-напруга

Другий та третій каскади однакові (рис. 2). Вони побудовані на спеціальній мікросхемі підсилювача з програмованим коефіцієнтом підсилення PGA103 фірми Burr-Brown. Подаючи цифрові сигнали з TTL-рівнями на управляючі входи A0 та A1, можна обирати одне із трьох підсилень: $\times 1$, $\times 10$, $\times 100$. Таким чином, два каскади дають підсилення до $\times 10000$. На вивід 3 подається опорна напруга, відносно якої здійснюється відлік сигналів. Джерело цієї напруги повинно мати дуже малий вихідний опір: навіть десяти долі ома спричинюють нелінійність величиною в десять долі відсотка при підсиленні у 100 разів [8]. Таким джерелом є повторювач напруги на базі операційного підсилювача OP07 (також належить до прецизійних).

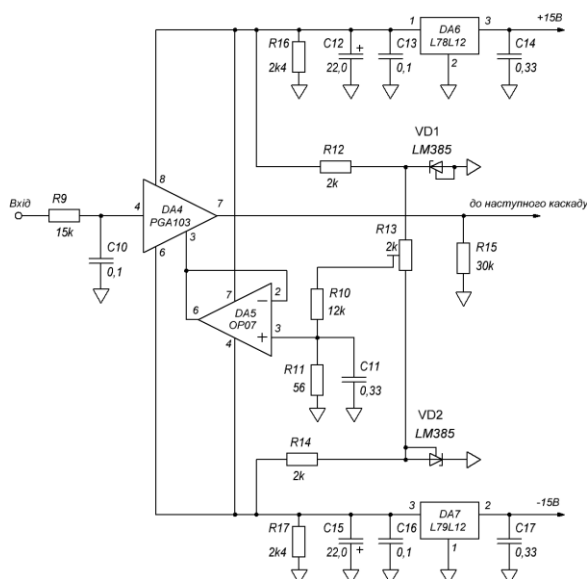


Рис. 2. Схема підсилювального каскаду на мікросхемі PGA103

Для задання опорних рівнів застосовано спеціальні мікросхеми так званих «програмованих стабілітронів» LM385. Їх вихідну напругу за необхідності можна змінювати подільником із двох резисторів. При включенні, показаному на рис. 2, напруга на LM385 складає 1,24 В.

Задавальні кола опорних рівнів спроектовані так, щоб мінімізувати їх опір, число елементів і, відповідно, чутливість до наводок. Через стабілітрони LM385 протікає струм 5,4 мА, а через підстроювальний резистор $R13$ – 1,24 мА. Схема розрахована таким чином, щоб забезпечити регулювання нуля в межах ± 5 мВ. Для додаткової стабільності до підстроювальних резисторів підключені конденсатори ємністю 0,33 мкФ.

Схема виявилась дуже критичною до компонування. Внаслідок невдалої топології друкованої плати у першій конструкції приладу спостерігалась генерація на частоті близько 200 кГц, яка починала суттєво проявлятися при підсиленнях $\times 1000$ і вище. Причини тому – близьке розташування двох мікросхем PGA і ряд паразитних ємностей між провідниками плати, через які вихід підсилювача взаємодіяв із входом.

При роботі в широкому динамічному діапазоні велике значення має врахування шумових характеристик елементів та впливу зовнішніх електромагнітних наводок.

Шуми у вигляді сигналів-завад, що приходять через зв'язки з джерелом живлення та заземлення, на практиці можуть бути важливіші, аніж внутрішні шуми. Шляхом правильного розташування й конструювання схеми ці завади можуть бути зменшені до несуттєвої величини [9].

Всередині приладу сигнали можуть досить легко проходити шляхом електростатичного зв'язку. Методи боротьби з цим – рознесення частин схеми у просторі, встановлення між ними електростатичних екранів, екранування кабелів, розміщення провідників упритул до земляних шин, а також зниження за можливістю повного опору входів [10].

Суттєвий вплив на роботу даного підсилювача чинять кондуктивні наводки. Кондуктивна наводка – це завада, що передається із сусідніх електричних кіл шляхом проходження електричного струму спільними провідниками, в основному, через спільні ділянки заземлення й живлення. Типовою причиною їх появи в системах промислової автоматизації є неправильне виконання заземлення [10]. Відзначимо також, що при передачі сигналу по кабелю між гальванічно зв'язаними приладами роль кондуктивних завад дуже значна.

З урахуванням вищесказаного, вирішили секціонувати схему та екранувати каскади. Для виключення кондуктивних наводок кожен каскад має власне стабілізоване живлення ± 12 В, а всі земляні провідники сходяться в одну точку. Це відзначено на схемах спеціальним символом аналогової землі. Один бік плати відведений для екраних та спільних провідників. Кожен каскад навантажений на резистор 30 кОм, а між ними увімкнені фільтри нижніх частот на 106 Гц (R9C10), які подавляють можливу високочастотну генерацію.

Подача зовнішніх управляючих сигналів організована через ключі на польових

транзисторах BSS123 для підвищення завадостійкості приладу. На рис. 3 показана схема такого ключа, а також їх увімкнення і таблиця кодів для керування підсиленням.

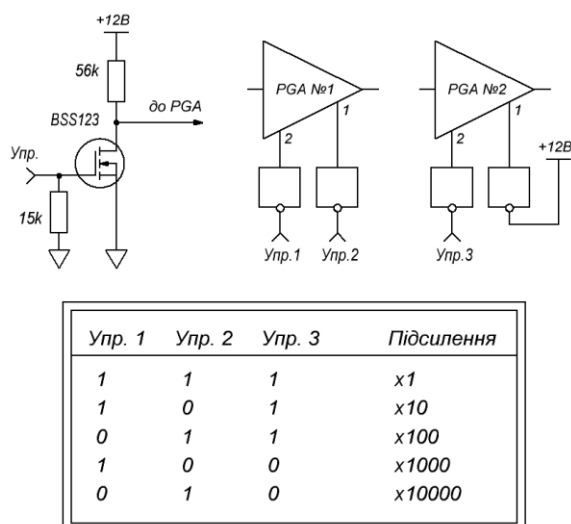


Рис. 3. Ключі цифрового управління підсиленням і таблиця відповідних кодів

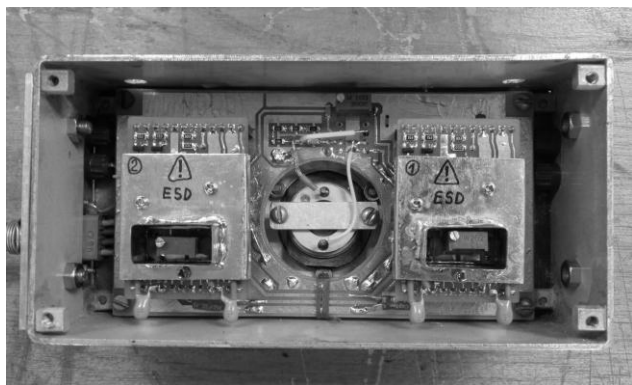


Рис. 4. Будова фотоприймального модуля.

Прилад скомпоновано за модульним принципом (рис. 4). Фотодіод з'єднується зі схемою короткими проводами. Підсилювальні PGA-каскади виконано у вигляді двох однотипних екранованих плат-вставок, які розміщуються на одній великій платі. На цій же платі знаходиться точка з'єднання земляних провідників. Усю схему вміщено в металевий корпус, який кріпиться на експериментальну установку. Живлення та сигнали надходять по кабелю через роз'єм типу РГ1Н-1-3.

Налаштування, робота і характеристики підсилювача

Виставлення нулів каскадів. Починаючи роботу з новим фотоприймальним модулем,

передусім потрібно виставити нулі кожного каскаду. Це можна зробити за допомогою вольтметра, включаючи його до проміжних контрольних точок і подаючи необхідні комбінації на управляючі входи. Мікросхема PGA103 видає напругу відносно того ж опорного рівня (вивід 3), відносно якого й сприймає її, тому в режимі x1 зсув нуля ні на що не впливає, вихідна напруга $U_{\text{вих}}$ буде в точності рівна вхідній $U_{\text{вх}}$. Цим можна скористатися при налаштуваннях.

Спочатку виконується компенсація зсуву нуля каскаду перетворювача струм-напруга. Якщо два наступних каскади при цьому працюватимуть в режимі повторювача, контрольний вольтметр можна вмикати на вихід приладу. Далі налаштовують наступні каскади. Згідно технічної документації на PGA103, для різних підсилень нулі можуть не співпадати. Тому для зменшення загальної похибки було прийнято рішення компенсувати зсуви нулів кожної PGA103 саме в режимі x100.

Після налаштувань ненульові значення вихідної напруги для кожного діапазону при затемненому фотодіоді варто записати для подальшої програмної корекції результатів вимірювань.

Перевірка лінійності. При проведенні гоніополіариметричних вимірювань в залежності від величини сигналу буде здійснюватись автоматичне перемикання діапазонів підсилення. Щоб можна було точно визначати співвідношення різних сигналів (важливо для еліпсометрії), повинна бути забезпечена «зшивка» діапазонів. Для цього варто перевірити лінійність підсилювача.

Найпростіший і найбільш правильний шлях для цього – скористатися джерелом випромінювання, інтенсивність якого можна змінювати за лінійним законом. Але за відсутністю такого джерела автори вирішили проконтролювати лінійність інакше.

На рис. 5 схематично показано принцип вимірювання при зміні в широкому динамічному діапазоні сигнальної напруги після першого каскаду-перетворювача $U_{\text{сигн}}$. Хай вона зменшується, тоді при досягненні вихідною напругою U_2 значення, в 10 разів менше початкового, вже можна вимірювати в наступному діапазоні – ця напруга не перевищить рівня насичення U_{max} . Для зашумлених сигналів можна ввести гістерезис величиною ΔU . Відповідно, робочі ділянки діапазонів наведено жирним.

Уявімо собі, що підсилювач нелінійний. Це означатиме, що графіки підсилення матимуть загин в області поблизу U_{max} , але в області невеликих вихідних напруг ($U_2 < \frac{1}{10} U_{max}$) їх ще можна вважати лінійними. Це означає, що контроль лінійності підсилень у різних діапазонах можна здійснити, порівнюючи вихідні напруги на спільних ділянках двох сусідніх діапазонів при однакових значеннях $U_{сигн}$.

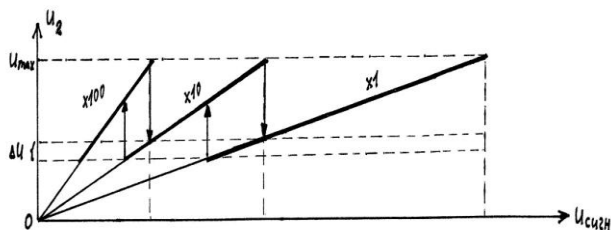


Рис. 5. Принцип перемикавання діапазонів.
Масштаби не дотримані

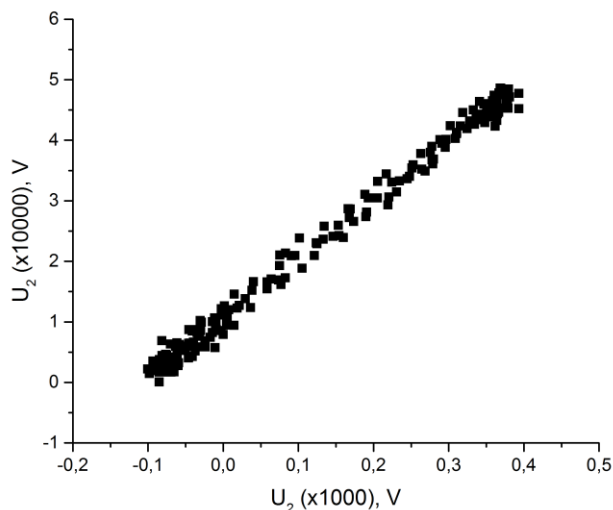


Рис. 6. Взаємна залежність вихідної напруги U_2 при підсиленнях $\times 10000$ та $\times 1000$ для перевірки лінійності діапазонів підсилювача

Розглянемо це на прикладі. Діапазон $\times 1$ – це режим повторювача, він лінійний апіорі. Встановимо таку інтенсивність джерела випромінювання, щоб у режимі $\times 10$ не було насичення підсилювача ($U_2 < U_{max}$). Для перевірки лінійності діапазону $\times 10$ будемо зменшувати цю інтенсивність і вимірювати сигнальні відгуки U_2 , порівнюючи їх з лінійними відгуками діапазону $\times 1$. Побудуємо залежність $U_{2 \times 10} U_{2 \times 1}$. По суті це параметрично задана

функція, яка повинна бути прямою з тангенсом кута нахилу 10.

Такі дослідження були проведені для чотирьох пар сусідніх діапазонів. Побудували залежності $U_{2 \times 10} U_{2 \times 1}$, $U_{2 \times 100} U_{2 \times 10}$, $U_{2 \times 1000} U_{2 \times 100}$ та $U_{2 \times 10000} U_{2 \times 1000}$. Остання, для прикладу, представлена на рис. 6. Ця залежність відповідає парі найчутливіших діапазонів і містить найбільше флуктуацій. Як бачимо, вона дуже близька до прямої.

Апроксимуючи дані залежності поліномами 2 степеня, одержали відносні нелінійності $\frac{\Delta U_2}{U_2 U_{max}}$ відповідно 0,002 (залежність $\times 1 \times 10$), 0,000 (залежність $\times 10 \times 100$), 0,004 (залежність $\times 100 \times 1000$) та 0,013 (залежність $\times 1000 \times 10000$). Відповідні тангенси кутів нахилу склали 10,00, 9,98, 9,97 та 9,81 – отже, маємо реальні значення коефіцієнтів підсилення, що дозволить іще точніше перерахувати результати вимірів. Як бачимо, лінійність підсилювача хороша.

Динамічний діапазон. Оцінімо динамічний діапазон нашого підсилювача, у розумінні приладу як цілого. Це є відношення максимально можливої сигнальної напруги до мінімальної, яку ще можна зареєструвати (фактично, до рівня шумів).

Максимальний сигнал буде у випадку, коли при одиничному підсиленні на виході буде $U_2 = 10$ В. Тобто $U_{сигн} = 10$ В = 10000 мВ.

При підсиленні у 10000 разів ширина шумової доріжки на виході складає 1,5 В. Це означає, що мінімальний рівень сигналу буде $U_{сигн} = 0,15$ мВ.

Таким чином, динамічний діапазон підсилювача

$$D = 20 \lg \frac{10000 \text{ мВ}}{0,15 \text{ мВ}} = 96,5 \text{ дБ}$$

Висновки

При побудові перетворювача струм-напруга важливо дотримуватись правил трасування слабкосигнальних кіл, зокрема, застосовувати охоронний контур на платі навколо входу. Висока струмова чутливість (40 В/мкА для першого каскаду) у поєднанні з великим підсиленням за напругою (до $\times 10000$) накладає високі вимоги до компоновки й екранування даного приладу.

Область робочих частот підсилювача лежить у межах 0...85 Гц. Це дозволяє працювати з постійними сигналами, а за необхідності промодулювати оптичний потік з невеликою

частотою. В розробленій схемі фізично підстроювальними резисторами можна встановити нулі з точністю близько 0,3 мВ. Подальшу компенсацію зсуву напруги слід виконувати програмно, на етапі обробки результатів вимірювань. Відносна нелінійність

підсилювача становить 1,3% при підсиленні $\times 10000$, а в решті діапазонів не перевищує 0,5%. За необхідності корекцію лінійності також можна здійснювати програмно.

Список використаної літератури

1. E. S. Voropai, V. I. Karas', and P. A. Torpachev, *Metrologiya*, No. 9, 31 (1985)
2. Yazawa, Y., Katoh, I. and Sonobe, S. (1990) Wide dynamic range photodiode arrays sensitive and stable to ultraviolet radiation. *Electron. Comm. Jpn. Pt. II*, 73: 1-10.
3. O.V. Slobodyaniuk, *Metodychni vkazivky do praktykumu «Osnovy radioelektroniky» dlya studentiv fizychnoho fakul'tetu [Methodical instructions for the "Fundamentals of Radio Electronics" workshop for students of the Physics Department]* // Ed. by O.V. Slobodyaniuk. – Kyiv, PrintLine Paleographic Centre, 2007, 120 p.
4. Peyton, Anthony J., Walsh, V. *Analog electronics with op amps: a source book of practical circuits*. Cambridge: Cambridge university press, 1993.
5. Borisevich K. OU dlya kontrolya fotodyodov [OpAmp for photodiode control]. *Radiomir*, 2008, 11, pp. 21-23, 12, pp. 19-20, 2009, 1, pp. 24-26 (Rus).
6. Graeme J. *Photodiode amplifiers: op amp solutions* / New York: McGraw-Hill – 1996.
7. Baranochnikov M.L. *Priyemniki i detektory izlucheniya. Spravochnik. [Receivers and radiation detectors. Directory.]*. Moscow, DMC Press, 2012, 640 p.
8. PGA 103 Programmable Gain Amplifier. / U.S.A: Burr-Brown Corporation, PDS-1208B, Nov. 1993. - 9 p.
9. Paul Horowitz and Winfield Hill, «The Art of Electronics», Cambridge University Press, 1980.
10. Denisenko V. *Zazemleniye v sistemakh promyshlennoy avtomatizatsii [Grounding in industrial automation systems]*. *Sovremennyye tekhnologii avtomatizatsii*. – 2006. – № 2. p. 94-99, №3. p. 76-92.

References

1. VOROPAI E. S., KARAS' V. I., TORPACHEV P. A. (1985) *Metrologiya*, N. 9, 31
2. YAZAWA, Y., KATOH, I. and SONOBE, S. (1990) Wide dynamic range photodiode arrays sensitive and stable to ultraviolet radiation. *Electron. Comm. Jpn. Pt. II*, 73: 1-10.
3. SLOBODYANIUK O.V. (2007), *Metodychni vkazivky do praktykumu «Osnovy radioelektroniky» dlya studentiv fizychnoho fakul'tetu [Methodical instructions for the "Fundamentals of Radio Electronics" workshop for students of the Physics Department]*. Ed. by O.V. Slobodyaniuk. Kyiv, PrintLine Paleographic Centre, 120 p.
4. PEYTON, ANTHONY J., WALSH, V. (1993) *Analog electronics with op amps: a source book of practical circuits*. Cambridge: Cambridge university press.
5. BORISEVICH K. (2008) OU dlya kontrolya fotodyodov [OpAmp for photodiode control]. *Radiomir*, 11, pp. 21-23, 12, pp. 19-20, 2009, 1, pp. 24-26.
6. GRAEME J. (1996) *Photodiode amplifiers: op amp solutions*. New York: McGraw-Hill.
7. BARANOCHNIKOV M.L. (2012) *Priyemniki i detektory izlucheniya. Spravochnik. [Receivers and radiation detectors. Directory.]*. Moscow, DMC Press, 640 p.
8. U.S.A. Burr-Brown Corporation. (1993) *PGA 103 Programmable Gain Amplifier*. PDS-1208B, 9 p.
9. PAUL HOROWITZ AND WINFIELD HILL (1980), «*The Art of Electronics*», Cambridge University Press.
10. DENISENKO V. (2006) *Zazemleniye v sistemakh promyshlennoy avtomatizatsii [Grounding in industrial automation systems]*. *Sovremennyye tekhnologii avtomatizatsii*. – № 2. p. 94-99, №3. p. 76-92.

Надійшла до редколегії 16.03.2018

Підписано до друку _____. Формат _____. Друк. офс.
Папір офс. № _____. Друк. арк. _____. Тираж _____. Зам. _____.
Друкарня _____.