

05(К.УН.)
Вісн



ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО
УНІВЕРСИТЕТУ**

**Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ
НАУКИ**

ВИПУСК №1 2006



Київ - 2006

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ВІСНИК

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК № 1 2006

Наукова бібліотека
ім. М. Максимовича
КНУ

ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА



12900JB

45 - чит зал періодики та дисерт Ц 10 00

Редакційна колегія:

- **Головний редактор – Булавін Леонід Анатолійович**, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор
- **Відповідальний секретар – Анісімова Тетяна Харитонівна**, старший науковий співробітник

Члени редколегії:

- **Адаменко Ірина Іванівна**, доктор фізико-математичних наук, професор (фізичний факультет);
- **Акименко Віталій Володимирович**, доктор технічних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Анісімов Анатолій Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Анісімов Ігор Олексійович**, доктор фізико-математичних наук, професор (радіофізичний факультет);
- **Гарашенко Федір Григорович**, доктор технічних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Єжов Станіслав Миколайович**, доктор фізико-математичних наук, професор (фізичний факультет);
- **Кириченко Володимир Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор (механіко-математичний факультет);
- **Козаченко Юрій Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор (механіко-математичний факультет);
- **Левитський Сергій Михайлович**, доктор фізико-математичних наук, професор (радіофізичний факультет);
- **Макара Володимир Арсенійович**, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор (фізичний факультет);
- **Перестюк Микола Олексійович**, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор (механіко-математичний факультет);
- **Попов Юрій Дмитрович**, доктор технічних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Скришевський Валерій Антонович**, доктор фізико-математичних наук, професор (радіофізичний факультет).

Друкується за рекомендаціями Вчених Рад фізичного, радіофізичного, механіко-математичного факультетів та факультету кібернетики.

Адреса редакційної колегії:

03022, вул. Глушкова, 2, корп. 6,
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
факультет кібернетики,
тел. (044) 259-01-49

ISBN 966-76-52-00-9

З М І С Т

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

Волошина Т.В. Конгруенції підстановочних зображень скінченної інверсної симетричної напівгрупи IS_n	9
Кадубовський О. Про один клас хордових диграфів максимального роду	17
Кирчей І.І. Правило Крамера над кватерніоновою алгеброю з діленням	28
Пашко А.О. Чисельне моделювання субгауссових випадкових полів	35
Похилько Д.І. Експоненційні нерівності для швидкості збіжності в рівномірній нормі вейвлет-оцінки щільності компоненти суміші	40
Шамілев Т.М. Твірні диференціального поля інваріантних диференціальних раціональних функцій лінійчатих поверхонь для дії групи $O(n, R)$ в R^n	48

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Калайда О.Ф. Двочторонні лінійні методи чисельного інтегрування задачі Коші для явних рівнянь	59
Крєневич А.П. Асимптотична еквівалентність розв'язків квазілінійних стохастичних систем Іто	69
Легеза В.П., П'ятецький В.О. Про диференціальне рівняння прямої лінії найшвидшого спуску важкого однорідного циліндра	77
Лісняк В.С. Диференціальна геометрія векторного поля	84
Лоос І.І. Дослідження циліндричної оболонки в магнітному полі	93
Магда О.В. Про групові властивості квазілінійних рівнянь гіперболічного типу	99
Островський В.В., Улітко А.Ф. Плоска та осесиметрична задачі для пружного шару на жорсткій основі при герцівському навантаженні	109
Харитонова Л.В. Аналіз розподілу прогину довгих гнучких циліндричних оболонок змінної кривизни в докритичній та закритичній областях	116
Яковенко Н.С. Розрахунок циліндричних оболонок з косими зрізами за допомогою сплайн-функцій	123

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Бичков О., Меркур'єв М. Існування та єдиність розв'язків нечіткого диференціального рівняння	131
Заславський В.А. Принцип різнотипності та особливості дослідження складних систем з високою ціною відмови	136
Кожематов А.Т., Хусаїнов Д.Я., Шатирко А.В. Керування до заданої функції Ляпунова в системах з запізненням	148
Крак Ю.В., Шатковський М.М. Сегментація мовної інформації для задач автоматичного озвучення	156
Кудін В.І. Аналіз моделі Леонт'єва при нечітко заданій множині обмежень на змінні	161
Марченко О.О. Методи автоматизації мовної локації розроблених онтологічних баз знань	166
Мащенко С.О. Векторні рівноваги у змішаних стратегіях	171
Нікітін А.В. Ітераційна процедура знаходження розв'язку матричного узагальненого рівняння Сільвестра для стохастичних динамічних систем не розв'язаних відносно диференціалів	178
Покутний О.О. Розв'язки лінійних різницевих рівнянь в банаховому просторі обмежені на всій цілочисельній вісі	182
Пришляк В.О. Про представлення для мінімаксних оцінок граничних значень розв'язків зовнішніх крайових задач для рівняння Гельмгольца	189
Россохата Н.О. Дослідження задачі трансмісії на власні значення за допомогою FD-методу	194
Савкіна М.Ю. Оцінювання параметрів моделі нелінійної сплайнової регресії: обчислювальні аспекти	204
Хлобистов В.В., Поповічева Т.М. Про операторну інтерполяцію та ідентифікацію нелінійних систем	209
Холод Д.В. Технології та методи розробки систем електронного навчання	216
Шаралов М.М. Критерій існування граничного значення степенів стохастичних матриць	223
Швець О.Ф. Побудова та дослідження збіжності ітераційної схеми для апроксимації вимірюваних сигналів на основі методу псевдообернення	229
Шевченко О.В. Підходи до здобування тематичної інформації із мережі Інтернет	235

РАДІОФІЗИКА

Бабіч І.Л., Веклич А.М., Крячко Л.О., Мінакова Р.В. Дослідження електродугової плазми з домішками срібла	243
Ільченко В.В., Квасниця М.В., Кравченко О.І., Майданник В.Г., Макаренков О.А. Аналіз продуктів дихання як новий підхід до моніторингу стану хворих на ниркову недостатність	248
Ільченко В.В., Кондратович О.Ю., Третяк О.В., Шкіль М.В. Дослідження впливу розподілених шарів квантових точок на частотну залежність ємності контакту метал-напівпровідник	256
Кисіль О.В., Коваленко А.В., Коваль І.П., Курашов В.Н. Надрозрізняюче відновлення сигналів у задачах електронної спектроскопії	266
Коваль І.П., Лень Ю.А., Находкін М.Г. Дослідження взаємодії кисню з поверхнею сплаву германій-кремній методами електронної спектроскопії	275
Кравченко О.Ю. Взаємодія шару пилових частинок з плазмою	284
Находкін М.Г., Куліш М.П., Родіонова Т.В. Вплив відпалювання на двійникові границі в рівноосьових полікремнієвих плівках	291
Находкін М.Г., Федорченко М.І. Електронна структура інтерфейсів Cu/Ge(111).	297
Поданчук Д.В., Данько В.П., Котов М.М., Сутягіна Н.С. Ітераційний метод розширення вимірювального діапазону сенсора хвильового фронту Шека-Хартмана	306

СУЧАСНА ФІЗИКА

Альошін О.Д., Радіус кореляції і рівняння стану обмежених систем поблизу критичної точки	315
Бабич М.Г., Захаренко М.І., Семенько М.П., Орленко М.В. Термомагнітна поведінка складнолегованих аморфних сплавів на основі $Fe_{84}Si_2B_{14}$	318
Беженар А.А., Копань В.С., Магдич В.Д. Повзучість фторопласту в модельному композиційному матеріалі	323
Булавін Л.А., Чалий К.О. Вплив просторової обмеженості на самодифузію молекул води в пористому склі	328
Ващенко В.М., Лоза Є.А., Патлашенко Ж.І., Банніков О.О., Черниш О.Є. Чисельний метод абераційного розрахунку монохроматорів. Ч. II.	338
Горшунов О.В., Січкарь Т.Г., Шут М.І. Граничні шари в	345

металонаповнених епоксидних композиціях	
Гречко Л.Г., Лерман Л.Б., Водоп'янов Д.Л., Шкода Н.Г., Шостак С.В. Іонно-електростатична взаємодія малих кульових частинок в розчині електроліту. Частина II. Обчислення енергії взаємодії при заданих щільностях поверхневих потенціалів	355
Корнієнко М.С., Науменко А.П. Спектри комбінаційного розсіяння другого порядку одностінних вуглецевих нанотрубок	362
Макара В.А., Стебленко Л.П., Курилюк А.М., Оглобля В.І., Кольченко Ю.Л., Науменко С.М. Вплив радіаційного опромінення на магнітомеханічний ефект та характер його релаксації	370
Охріменко Б.А., Яблочкова К.С. Оцінка коливального моменту імпульсу молекули H_2O_2	379
Пивоваренко Ю.В., Ляхов О.М., Шевченко В.Б. Залежність спектральних характеристик води від її електричного потенціалу	387
Пророк В.В., Макаренко Т.І., Мельниченко Л.Ю. Дослідження зв'язку між надходженням ^{137}Cs до рослини та складом ґрунтового розчину	392
Рапопорт Ю.Г. Іоносферний відгук на просторовий пакет атмосферних гравітаційних хвиль з нижньої атмосфери	399
Борисова М.С., Синюков Ю.М. Спектри та кореляції в гідродинамічному підході з неперервною емісією при енергіях RHIC	411

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ЙМОВІРНОСТЕЙ

УДК 512.53

Тетяна В. Волошина

Tatiana V. Voloshyna

Конгруенції підстановочних зображень скінченної інверсної симетричної напівгрупи IS_n .

Congruences of permutation representations of finite inverse symmetric semigroup IS_n .

Обчислено степені транзитивних підстановочних зображень інверсної симетричної напівгрупи IS_n .

We have counted the degrees of transitive permutation representations of the inverse symmetric semigroup IS_n .

Ключові слова: конгруенція, інверсна симетрична напівгрупа, підстановочне зображення.

Key Words: congruence, inverse symmetric semigroup, permutation representation.

1. Вступ

Нехай S інверсна напівгрупа. Через ω будемо позначати так званий природний частковий порядок на S : $a\omega b \Leftrightarrow aa^{-1} = ab^{-1} \Leftrightarrow a^{-1}a = a^{-1}b$. Для зручності іноді будемо вживати для ω і позначення $\leq$.

Замиканням $H\omega$ множини $H \subseteq S$ називається множина $H\omega = \{h \in S : \exists \pi \in H \pi\omega h\}$. Якщо $H\omega = H$, то H називається замкненою.

Множину ідемпотентів напівгрупи S позначимо через $E(S)$.

Напівгрупу всіх часткових взаємно однозначних відображень деякої множини X в саму себе будемо називати інверсною симетричною напівгрупою на множині X , і позначати $IS(X)$ або IS_n , якщо $|X| = n$. Елементи напівгрупи $IS(X)$ називають частковими підстановками множини X .

Підстановочним зображенням інверсної напівгрупи S називається довільний її гомоморфізм φ в інверсну симетричну напівгрупу $IS(X)$ на деякій множині X .

Оскільки кожне ефективне зображення інверсної напівгрупи еквівалентне прямій сумі транзитивних, спочатку природно розглянути лише транзитивні підстановочні зображення.

Для замкненої інверсної піднапівгрупи H інверсної напівгрупи S розглянемо часткову праву конгруенцію $\pi_H := \{(s, t) \in S \times S \mid st^{-1} \in H\}$. Класами еквівалентності цього відношення є множини $(Hs)\omega$, де $ss^{-1} \in H$, які будемо називати правими ω -класами за замкненою інверсною піднапівгрупою H . На множині X правих ω -класів за H дія $\varphi(S)$

визначається правилом: для $x \in X$ і $s \in S$ $x^{\varphi_H(s)} = (xs)\omega$. Класи еквівалентності конгруенції π_H на S будемо називати *правими ω -класами* за замкненою інверсною піднапівгрупою H . Зображення $\varphi: S \rightarrow IS(X)$ будемо називати *зображенням напівгрупи S на правих ω -класах* за замкненою інверсною піднапівгрупою H . У роботі [1] Шайн довів, що кожне ефективне транзитивне зображення інверсної напівгрупи S еквівалентне зображенню напівгрупи на множині правих ω -класів за деякою замкненою інверсною піднапівгрупою.

Нехай $N = \{1, 2, \dots, n\}$, IS_n – інверсна симетрична напівгрупа на множині N , $S(M)$ – симетрична група на множині M . Для $\pi \in IS_n$ через $\text{dom } \pi$ і $\text{ran } \pi$ позначимо відповідно область визначення та область значень часткової підстановки π . Рангом часткової підстановки π будемо називати потужність її області визначення і будемо позначати $\text{rank } \pi$.

Опис усіх замкнених інверсних піднапівгруп інверсної симетричної напівгрупи дає теорема.

Теорема 1 [2]. Для кожної підмножини $M \subseteq N$ і підгрупи $G \leq S(M)$ піднапівгрупа $H = G \oplus IS_{\bar{M}}$ буде замкненою інверсною піднапівгрупою в IS_n . З іншого боку, кожна замкнена інверсна піднапівгрупа в IS_n має такий вигляд.

Для замкненої інверсної піднапівгрупи $H = G \oplus IS_{\bar{M}}$ позначимо $|M| = k$, $|G| = m$, $[S(M):G] = \frac{k!}{m} = r$. Кількість правих ω -класів напівгрупи IS_n за замкненою інверсною піднапівгрупою H позначимо $[IS_n : H]$.

Теорема 2 [2]. Нехай $H = G \oplus IS_{\bar{M}}$ – замкнена інверсна піднапівгрупа. Кожний правий ω -клас інверсної напівгрупи IS_n за замкненою інверсною піднапівгрупою $H = G \oplus IS_{\bar{M}}$ має вигляд $(Hg)\omega$, де $g \in S(N)$, містить правий клас суміжності Ag групи $S(N)$ за підгрупою $A = G \oplus S(\bar{M})$, причому ця відповідність між правими ω -класами і класами суміжності за підгрупою A є взаємно однозначною. $[IS_n : H] = [S(N) : G \oplus S(\bar{M})] = \frac{n!}{m \cdot (n-k)!} = C_n^k \cdot [S(M) : G] = C_n^k \cdot r$. Всі праві ω -класи рівнопотужні піднапівгрупі H .

2. Конгруенції підстановочних зображень інверсної симетричної напівгрупи IS_n

Нехай $\varphi: IS_n \rightarrow IS(X)$ – підстановочне зображення напівгрупи IS_n на множині X правих ω -класів за замкненою інверсною піднапівгрупою H . Будемо розглядати конгруенцію $\varphi \circ \varphi^{-1} = \{(x, y) \in IS_n \times IS_n \mid \varphi(x) = \varphi(y)\}$ на множині елементів напівгрупи IS_n . Обчислимо кількість класів еквівалентності цієї конгруенції для різних замкнених інверсних піднапівгруп H .

Теорема 3 [2]. Зображення інверсної симетричної напівгрупи IS_n на множині правих ω -класів за замкненою інверсною піднапівгрупою $H = G \oplus IS_M$ буде точним тоді і тільки тоді, коли $|M| = k = 1$. Кожне точне ефективне транзитивне зображення напівгрупи IS_n еквівалентне стандартному зображенню IS_n частковими підстановками на множині $\{1, 2, \dots, n\}$.

Тому усі класи еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$ будуть одноелементними тоді і тільки тоді, коли $H = 1_{(i)} \oplus IS_{M \setminus \{i\}}$ для $i \in N$. У

цьому випадку $|\varphi(IS_n)| = |IS_n| = \sum_{i=0}^n (C_n^i)^2 \cdot i!$.

Позначимо $I_k = \{\pi \in IS_n \mid \text{rank } \pi < k\}$.

Лема 1. Множина I_k складає один клас еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$. Для кожного елемента $t \in I_k$ його образ $\varphi(t)$ – ніде не визначена часткова підстановка на множині правих ω -класів за замкненою інверсною піднапівгрупою $H = G \oplus IS_M$.

▲ Розглянемо довільний правий ω -клас $(Hx)\omega$ і $t \in I_k$. Позаяк $\text{dom}(xtt^{-1}x^{-1}) = x^{-1}(\text{ran } x \cap \text{dom } t)$, $\text{rank}(xtt^{-1}x^{-1}) = |\text{ran } x \cap \text{dom } t| \leq |\text{dom } t| < k$. Оскільки для всіх $h \in H$ $\text{rank } h \geq k$, елемент $xtt^{-1}x^{-1} \notin H$, що рівносильно $(Hx)\omega^{\varphi(t)} = \emptyset$. Отже, для кожного $t \in I_k$ його образ $\varphi(t)$ – ніде не визначена часткова підстановка на множині правих ω -класів за піднапівгрупою H .

Розглянемо тепер довільний $t \in IS_n$ рангу $r \geq k$. Тоді існує такий ідемпотент $e \in E(H)$, що $\text{rank } e = r$. Виберемо такий $x \in IS_n$, що $\text{dom } x = \text{dom } e$, $\text{ran } x = \text{dom } t$. Тоді $xx^{-1} = e \in H$, $x^{-1}x = t^{-1}$ і

$x t t^{-1} x^{-1} = x(x^{-1} x) x^{-1} = x x^{-1} = e \in H$. Тому $(Hx)\omega \neq \emptyset$ і $(Hx)\omega^{\varphi(t)} = (Hxt)\omega \neq \emptyset$, тобто $\varphi(t)$ – визначена на $(Hx)\omega$.

Отже, один із класів еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$ збігається з I_k . ■

Позначимо через A_e – клас еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$, що містить ідемпотент e . За теоремою 7.48 [3, §7.4], A_e – інверсна напівгрупа. Через e_H – позначимо найменший ідемпотент напівгрупи H .

Лема 2. Для кожного ідемпотента e напівгрупи IS_n рангу $r \geq k$ A_e – група. Зокрема, $A_{e_H} = G_0 \oplus 0$, де G_0 – максимальна нормальна підгрупа групи $S(M)$, що міститься в G . Усі класи еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$, що містять елементи рангу k , рівнопотужні. Їх потужність дорівнює $|G_0|$.

▲ Зауважимо спочатку, що для кожного ідемпотента $e \in E(IS_n)$ часткова підстановка $\varphi(e)$ – тотожно діє на своїй області визначення. Справді, $(Hxe)\omega \neq \emptyset \Leftrightarrow x e x^{-1} \in H \Leftrightarrow (Hx)\omega = (Hxe)\omega$. Тому $(Hx)\omega^{\varphi(e)} = (Hxe)\omega = (Hx)\omega$.

Розглянемо тепер ідемпотент e рангу $r \geq k$. Нехай $(Hx)\omega$ – довільний правий ω -клас і $\text{dom } x = M$, $\text{ran } x = M'$. Тоді $(Hx)\omega^{\varphi(e)} \neq \emptyset \Leftrightarrow x e x^{-1} \in H \Leftrightarrow x e x^{-1} \geq e_H$. З іншого боку, $x e x^{-1} \leq x x^{-1} = e_H$. Тому $x e x^{-1} = e_H$. Звідси $(x^{-1} x)e = (x^{-1} x)(x^{-1} x)e = x^{-1}(x e x^{-1})x = x^{-1} e_H x = x^{-1} x x^{-1} x = x^{-1} x$. Із рівності $(x^{-1} x)e = x^{-1} x$ можна легко отримати $x e x^{-1} = e_H$. Справді, $x e x^{-1} = (x x^{-1} x) e x^{-1} = x(x^{-1} x) e x^{-1} = x x^{-1} x x^{-1} = x x^{-1} = e_H$. Отже, $(Hx)\omega^{\varphi(e)} \neq \emptyset \Leftrightarrow e \geq x^{-1} x \Leftrightarrow \text{dome} \supseteq M'$.

Припустимо, що $e, f \in E(IS_n)$ рангу не менше k і $\varphi(e) = \varphi(f)$. Нехай $i \in \text{dome}$. Тоді існує така $M' \subseteq \text{dome}$, що $i \in M'$, $|M'| = k$. Нехай $x \in IS_n$ такий, що $\text{dom } x = M$, $\text{ran } x = M'$. За доведеним вище, $(Hx)\omega^{\varphi(e)} \neq \emptyset$. Тоді $(Hx)\omega^{\varphi(f)} \neq \emptyset$ і $M' \subseteq \text{dom } f$. Тому $i \in \text{dom } f$. Отже, $\text{dome} \subseteq \text{dom } f$, тобто $e \leq f$. Аналогічно доводимо, що $e \geq f$. Із рівності $e = f$ випливає, що класи еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$ містять не більше одного ідемпотента рангу $r \geq k$. Тому для таких ідемпотентів інверсна напівгрупа A_e є групою.

За теоремою 7.48 [3, §7.4], $\varphi \circ \varphi^{-1} = \{(a, b) \in S \times S \mid aa^{-1}, bb^{-1}, ab^{-1} \in A_e \text{ для деякого } e \in E(S)\}$. Тому із $a(\varphi \circ \varphi^{-1})b$ випливає, що $aa^{-1} = bb^{-1} = e$, $\text{dom } a = \text{dom } b = \text{dome}$ і $\text{rank } a = \text{rank } b = \text{rank } e$.

Для довільного $x = g \oplus \pi$, де $g \in S(M)$, $\pi \in IS(\bar{M})$ $y := xe_H = g \oplus 0$. Оскільки $xy^{-1} = xe_Hx^{-1} = gg^{-1} \oplus \pi \cdot 0 = e_H \in H$, $(Hx)\omega^{\varphi(e_H)} = (Hxe_H)\omega = (Hy)\omega = (Hx)\omega$.

Розглянемо тепер такий $(Hx)\omega$, що $(M)^s = M' \neq M$. Позаяк $g := e_Hx \in (Hx)\omega$, $(Hx)\omega = (Hg)\omega$. Оскільки $\text{rang } g = M' \not\subseteq \text{dome}_H$, $\varphi(e_H)$ не визначена на $(Hx)\omega$. Отже, для довільного $x \in S(M) \oplus IS_{\bar{M}}$ $(Hx)\omega^{\varphi(e_H)} = (Hx)\omega$ і $\varphi(e_H)$ визначена лише на таких правих ω -класах.

Нехай $t \in A_{e_H}$. Тоді $\text{dom } t = M$, $\text{rank } t = k$. Для довільного $g \in S(M) \oplus 0$ $(Hg)\omega^{\varphi(t)} = (Hg)\omega$. Тоді $gtg^{-1} \in H = G \oplus IS_{\bar{M}}$. З одного боку $\text{rank}(gtg^{-1}) \leq k$, а з іншого H містить елементи рангу не менше k . Тому $\text{rank}(gtg^{-1}) = k$ і $gtg^{-1} \in G \oplus 0$. Звідси $t \in g^{-1}Gg \oplus 0$ для всіх $g \in S(M) \oplus 0$. Обмежимо часткову підстановку t на множину M : $t|_M \in \bigcap_{g \in S(M)} g^{-1}Gg$.

Використовуючи методи теорії груп можна переконатися, що $G_0 := \bigcap_{g \in S(M)} g^{-1}Gg$ – максимальна нормальна піднапівгрупа групи $S(M)$, що міститься в G . Тому $A_{e_H} = G_0 \oplus 0$.

Розглянемо тепер $e \in E(IS_n)$ рангу k з областю визначення $\text{dome} = M'$. Нехай $s \in IS_n$, $\text{dom } s = M$, $\text{rang } s = M'$. За теоремою 7.48 [3, §7.4], із рівності $s^{-1}e_Hs = s^{-1}ss^{-1}s = s^{-1}s = e$ випливає включення $s^{-1}A_{e_H}s \subseteq A_e$. Аналогічно із $ses^{-1} = ss^{-1}ss^{-1} = ss^{-1} = e_H$ випливає $sA_es^{-1} \subseteq A_{e_H}$. Оскільки $A_{e_H} = ss^{-1}A_{e_H}ss^{-1} \subseteq sA_es^{-1} \subseteq A_{e_H}$, виконується рівність $A_e = s^{-1}A_{e_H}s$. Усі елементи A_e мають однакову область визначення M' . Тому $A_e|_{M'} = s^{-1}|_M \cdot G_0s|_M = G_0^s$. Таким чином, $A_e = G_0^s \oplus 0$, де G_0^s – подібна до G_0 група підстановок на множині M' . Очевидно, $|A_e| = |G_0^s| = |G_0| = |A_{e_H}|$.

Обчислимо потужність класу еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$, що містить елемент b рангу k . Нехай $a(\varphi \circ \varphi^{-1})b$. Тоді $\text{dom } a = \text{dom } b = \text{dome}$, $ab^{-1} \in A_e$ для деякого $e \in E(IS_n)$ рангу k . Тоді $a \in A_e b = (G_0^s \oplus 0)b = G_0^s b \oplus 0$. Множина $G_0^s b \oplus 0$ – клас еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$, що містить елемент b . Тоді $|G_0^s b \oplus 0| = |G_0^s b| = |G_0^s| = |G_0|$. ■

Лема 3. Нехай $0 < k < n$. Тоді кожний $t \in IS_n$, такий що виконується умова $k < \text{rank } t \leq n$ складає одноелементний клас еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$.

▲ За теоремою 3, для $k=1$ зображення φ – точно і всі класи еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$ одноелементні. Тому надалі $k > 1$.

Розглянемо спочатку ідемпотент e рангу $r > k$. За лемою 2, $\varphi(e)$ фіксує правий ω -клас $(Hg)\omega$, де $g \in S(N)$, $g(M) = M'$, тоді і тільки тоді, коли $M' \subseteq \text{dome}$. Нехай $t \in A_e$. Тоді $\text{dom } t = \text{dome}$ і аналогічно до відповідного фрагменту доведення лема 2 можна отримати $t \in g^{-1}|_{M'} Gg|_M \oplus 0 = G^k \oplus 0$ для всіх $g \in S(N)$, $g(M) = M' \subseteq \text{dome}$. dome містить $C_r^k > 1$ різних k -елементних підмножин. Тому $t(M') = M'$ для всіх $M' \subseteq \text{dome}$, $|M'| = k$.

Розглянемо довільний $i \in \text{dome}$. Існує така $M_1 \subseteq \text{dome}$, що $i \in M_1$ і $|M_1| = k$. Оскільки $\text{rank } e > k$, існує $j \in \text{dome} \setminus M_1$. Нехай $M_2 = (M_1 \setminus \{i\}) \cup \{j\}$. Очевидно, $|M_2| = k$. Так як $t(M_1) = M_1$, існує такий $k \in M_1$, що $t(k) = i$. Припустимо, що $k \neq i$. Тоді $k \in M_2$, $i = t(k) \subseteq t(M_2) = M_2$, що суперечить побудові M_2 . Тому $k = i$ та $t(i) = i$ для всіх $i \in \text{dome}$. Отже, $t = e$ і $A_e = \{e\}$.

Нехай тепер елементи a, b мають ранг більше k і $a(\varphi \circ \varphi^{-1})b$. Тоді існує такий $e \in E(IS_n)$, що $aa^{-1} = bb^{-1} = ab^{-1} = e$. З рівності $ab^{-1} = aa^{-1}$ випливає $a \leq b$, а з $ba^{-1} = bb^{-1}$ – $a \geq b$. Тому $a = b$. ■

Позначимо $\varphi_A: S(N) \rightarrow S(Y)$ – підстановочне зображення симетричної групи $S(N)$ на множині Y правих класів суміжності групи $S(N)$ за підгрупою $A = G \oplus S(\bar{M})$.

Лема 4. Нехай $0 < k \leq n$. Тоді для кожного $t \in IS_n$, $\text{rank } t = n$ підстановка $\varphi(t) \in S(X)$ на множині X правих ω -класів за замкненою інверсною піднапівгрупою $H = G \oplus IS_{\bar{M}}$ подібна до підстановки $\varphi_A(t) \in S(Y)$ на множині Y правих класів суміжності групи $S(N)$ за підгрупою $A = G \oplus S(\bar{M})$.

▲ За теоремою 2, кожний правий ω -клас інверсної напівгрупи IS_n за замкненою інверсною піднапівгрупою $H = G \oplus IS_{\bar{M}}$ має вигляд $(Hg)\omega$, де $g \in S(N)$, містить правий клас суміжності Ag групи $S(N)$ за підгрупою $A = G \oplus S(\bar{M})$, причому ця відповідність $\theta: X \rightarrow Y$, $(Hg)\omega \mapsto Ag$, між правими ω -класами і класами суміжності за підгрупою A є взаємно однозначною. Насамкінець зауважимо, що для довільного $t \in S(N)$

$(Hg)\omega^{(t)} = (Hgt)\omega$, де $gt \in S(N)$, і $(Ag)^{\varphi_A(t)} = Agt$. Тому $\varphi_A(t)$ і $\varphi(t)$ для всіх $t \in S(N)$ – подібні підстановки. ■

Зауваження 1. При $k=0$, $M=\emptyset$ і $H=IS_n$. Очевидно, що при цьому усі елементи напівгрупи IS_n містяться в одному правому ω -класі, який фіксує підстановка $\varphi(t)$ для кожного $t \in IS_n$. Конгруенція $\varphi \circ \varphi^{-1}$ при цьому має один клас еквівалентності і $|\varphi(IS_n)|=1$.

Зауваження 2. При $k=n$, $M=N$ і $H=G \leq S(N)$. За лемою 1, усі негрупові елементи IS_n діють як порожня підстановка. Тому $\varphi(IS_n)$ – група підстановок з нулем.

Теорема 4. Конгруенція $\varphi \circ \varphi^{-1}$, побудована по підстановочному зображенню $\varphi: IS_n \rightarrow IS(X)$ інверсної напівгрупи IS_n на множині X правих ω -класів за замкненою інверсною піднапівгрупою $H=G \oplus IS_M$, де $G \leq S(M)$, $|M|=k$, буде конгруенцією Ріса тоді і тільки тоді, коли G не нормальна підгрупа симетричної групи $S(M)$ або $G=\{1\}$. У цьому випадку $|\varphi(IS_n)|=1 + \sum_{i=k}^n (C_n^i)^2 \cdot i!$. Зокрема, при $k=n$ $|\varphi(IS_n)|=1+n!$

▲ У випадку $k=0$, із зауваження 1 випливає, що конгруенція $\varphi \circ \varphi^{-1}$ є універсальним відношенням на множині елементів напівгрупи IS_n .

Надалі $k>0$. За лемою 1, для всіх замкнених інверсних піднапівгруп H множина I_k збігається з класом еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$ і є ідеалом напівгрупи IS_n .

За лемою 3, елементи рангу $r>k$ містяться в одноелементних класах еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$.

За лемою 2, елементи рангу k містяться в одноелементних класах еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$ тоді і тільки тоді, коли група G не містить нормальних підгруп групи $S(M)$, відмінних від одиничної. Отже, у випадку $G \triangleleft S(M)$ і $G \neq \{1\}$ конгруенція $\varphi \circ \varphi^{-1}$ не буде конгруенцією Ріса. Зауважимо, що власною нормальною підгрупою в скінченній симетричній групі $S(M)$ є лише відповідна знакозмінна група $A(M)$, а у випадку $|M|=4$, ще і підгрупа K_4 . З іншого боку, кожна не нормальна підгрупа групи $S(M)$ не містить нормальних підгруп групи $S(M)$, відмінних від одиничної. ■

Твердження 5. Для нормальної підгрупи $G \triangleleft S(M)$, $|M| = k$, порядку m і підстановочного зображення φ інверсної симетричної напівгрупи IS_n на множині правих ω -класів за замкненою інверсною піднапівгрупою

$$H = G \oplus IS_{\bar{M}} \quad |\varphi(IS_n)| = 1 + \frac{(C_n^k)^2 \cdot k!}{m} + \sum_{i=k+1}^n (C_n^i)^2 \cdot i!$$

▲ Кількість елементів рангу k в напівгрупі IS_n дорівнює $(C_n^k)^2 \cdot k!$. За лемою 2, для $G \triangleleft S(M)$ усі класи еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$, що складаються з елементів рангу k , мають потужність $|G| = m$. Тому кількість таких класів еквівалентності $\frac{(C_n^k)^2 \cdot k!}{m}$. За лемою 3, елементи рангу $r > k$ містяться в одноеlementних класах еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$. Їх $\sum_{i=k+1}^n (C_n^i)^2 \cdot i!$. За лемою 1, множина I_k збігається з одним класом еквівалентності конгруенції $\varphi \circ \varphi^{-1}$. ■

Розглянемо випадки нормальних підгруп групи $S(M)$.

$$1) \ G = A(M). \text{ Тоді } |\varphi(IS_n)| = 1 + 2(C_n^k)^2 + \sum_{i=k+1}^n (C_n^i)^2 \cdot i!$$

$$\text{Зокрема, при } k = n \quad |\varphi(IS_n)| = 1 + 2(C_n^n)^2 = 3.$$

$$2) \ G = S(M). \text{ Тоді } |\varphi(IS_n)| = 1 + (C_n^k)^2 + \sum_{i=k+1}^n (C_n^i)^2 \cdot i!$$

$$\text{Зокрема, при } k = n \quad |\varphi(IS_n)| = 1 + (C_n^n)^2 = 2.$$

$$3) \ k = 4, \ G = K_n. \text{ Тоді } |\varphi(IS_n)| = 1 + 6(C_n^4)^2 + \sum_{i=5}^n (C_n^i)^2 \cdot i!$$

$$\text{Зокрема, при } k = n = 4 \quad |\varphi(IS_n)| = 1 + 6(C_n^4)^2 = 7.$$

Література

1. Шайн Б.М. Представление обобщенных групп // Изв. вузов. "Математика". - 1962. - Т.28, № 3. - С. 164-176.
2. Волошина Т.В. Ефективні транзитивні зображення скінченної інверсної симетричної напівгрупи // Вісник Київського Університету. Математика і механіка. - 1998. - Вип.2. - С.16-21.
3. Клиффорд А., Престон Г. Алгебраическая теория полугрупп. Пер. с англ. В 2 т. - М.: Мир, 1972. - Т.1,2. - 283 с., 422 с.

Надійшла до редакції 09.06.2005

УДК 517.91:519.514.17

Олександр Кадубовський

Про один клас хордових діаграм максимального роду.

В роботі розглядаються клас хордових діаграм певного виду. Підраховано число нееквівалентних таких діаграм під дією циклічної групи.

Ключові слова: хордова діаграма, цикл діаграми, рід діаграми.

O. Kadubovsky

The family of chord diagrams of maximal genus.

In this paper we consider the subset of chord diagrams of order n . We determine the number of nonequivalent such diagrams under the action of cyclic group C_n .

Key Words: chord diagram, faces of diagram, genus of diagram.

¹ E-mail: kadubovs@imath.kiev.ua

1. Вступ

Однією з основних задач багатьох галузей математики, зокрема диференціальної топології, є задача класифікації об'єктів що вивчаються, яка, в свою чергу, потребує побудову інваріантів що розрізняють. В більшості випадків, для розв'язання останньої ефективно використовуються комбінаторні об'єкти, а саме, деякі графи з додатковою інформацією.

Конструкції, схожі до кола з відміченими точками, були застосовані, наприклад, в роботах [1], [2], [3], при класифікації векторних полів Морса-Смейла. Зокрема, в роботах [2], [3] ці об'єкти були використані для підрахунку числа топологічно нееквівалентних мінімальних полів Морса-Смейла.

В роботі [4] при класифікації функцій Морса на орієнтованих поверхнях були використані хордові діаграми. В роботі [5] за допомогою хордових діаграм максимального роду [7] було пред'явлено число нееквівалентних функцій Морса на компактних поверхнях під дією певної групи.

Нагадаємо, що хордовою діаграмою порядку n або, коротко, n -діаграмою називають конфігурацію на площині, що складається з кола та n хорд, які з'єднують $2n$ різних точок на ньому. Дві хордові діаграми називають ізоморфними, якщо одну з них можна одержати з іншої в результаті деякого повороту.

Задача про підрахунок числа неізоморфних хордових діаграм була повністю розв'язана в роботах [6], [7], [8]. Зокрема, в роботі [7] було підраховано число неізоморфних діаграм максимального роду.

Підрахунок числа неізоморфних діаграм фіксованого роду є достатньо складною і в загальному випадку не розв'язаною задачею. Якщо ж обмежитися розглядом певного класу хордових діаграм, то задача значно спрощується.

В роботі [9] при класифікації топологічно нееквівалентних мінімальних функцій (які мають в точності один максимум, один мінімум та одну

вироджену критичну точку типу сідло) на замкненій орієнтованій поверхні роду g були використані, так звані, двокольорові хордові O -діаграми максимального роду. Початкові значення числа нееквівалентних таких функцій для орієнтованих поверхонь роду $g = 1, 2, 3$ було підраховано в роботі [10]. В [9] встановлено, що число нееквівалентних функцій з вказаного класу дорівнює числу неізоморфних O -діаграм максимального роду з $n = 2g + 1$ хордами. Там же для простих $n = 2g + 1$ підраховано число неізоморфних таких діаграм.

В даній статті узагальнюється результат роботи [9] на випадок довільного непарного n . Повністю розв'язане питання про підрахунок числа топологічно нееквівалентних мінімальних функцій на замкненій орієнтованій поверхні довільного роду g .

2. Необхідні допоміжні відомості

Означення 1. Двокольоровою хордовою діаграмою з n хордами будемо називати n -діаграму, дуги кола якої розфарбовано в два кольори (чорний і білий) так, що будь-які сусідні дуги різного кольору (рис. 1 С)).

Слідуючи [9], всі 2-кольорові діаграми будуються на основі шаблону (рис. 1 В). Під шаблоном слід розуміти коло з фіксованою нумерацією за годинниковою стрілкою $2n$ точок на ньому, які є вершинами правильного $2n$ -кутника; дуги $b_1 = \langle 2, 1 \rangle, b_2 = \langle 4, 3 \rangle, \dots, b_n = \langle 2n - 1, 2n \rangle$ чорного кольору, а $w_1 = \langle 3, 2 \rangle, w_2 = \langle 5, 4 \rangle, \dots, w_n = \langle 2n, 1 \rangle$ – білого.

Означення 2. Діаграми D_1 і D_2 називатимемо ізоморфними, якщо одну з них можна отримати з іншої в результаті повороту на деякий кут $\omega = q \cdot \pi / n$, $q = 1, \dots, 2n$ навколо спільного центру.

Зрозуміло, що поворот 2-кольорової діаграми коректно визначений лише при парних q .

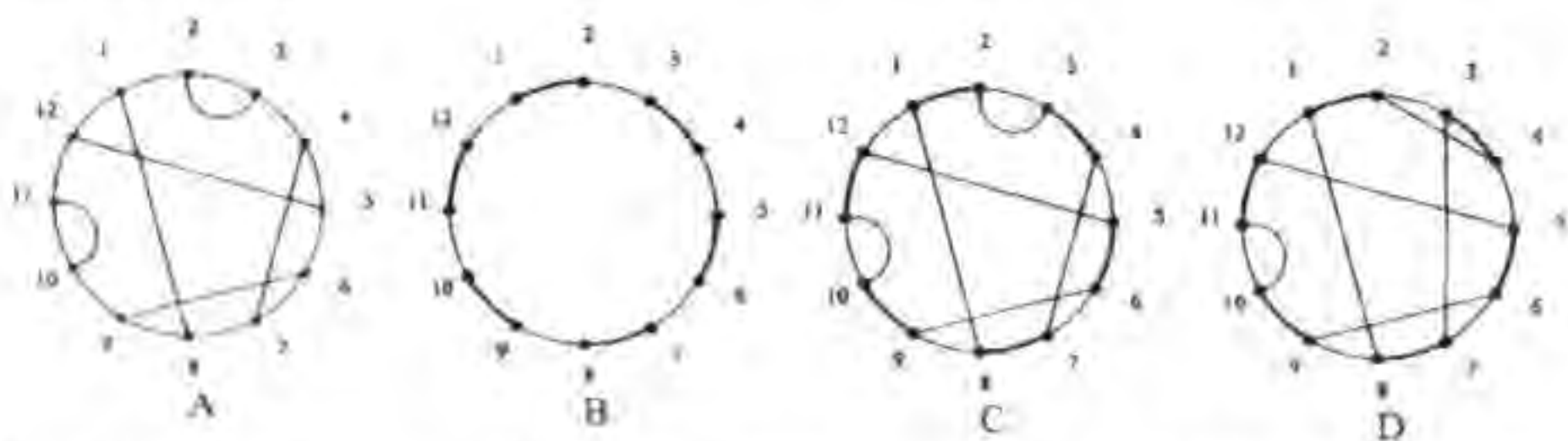


Рис. 1. А) – 6-діаграма $D(\alpha)$, $\alpha = (1,8)(2,3)(4,7)(5,12)(6,9)(10,11)$; В) – шаблон; С) – O -діаграма; D) – N -діаграма.

Означення 3. 2-кольорову діаграму, яка не містить (містить) хорду, що сполучає точки з номерами однакової парності, будемо називати O -діаграмою (N -діаграмою) – рис. 1 С), D).

Означення 4. Чорним (білим) циклом^у діаграми, з обраним напрямком на колі, будемо називати послідовність хорд і чорних (білих) дуг, які утворюють гомеоморфний образ орієнтованого кола.

Якщо проігнорувати колір, то кожен чорний (білий) цикл 2-кольорової O -діаграми співпадає з відповідним циклом звичайної діаграми (рис. 1 A, C). Тоді слідуючи [7], природнім чином визначається рід 2-кольорової O -діаграми.

Означення 4. Родом 2-кольорової O -діаграми будемо називати ціле число g , яке визначається співвідношенням: $g = (n + 1 - \lambda) / 2$, де λ – сумарне число чорних і білих циклів діаграми.

Зауваження 1. Для O -діаграми числа n, λ різної парності.

Означення 5. Діаграму з двома циклами (1 чорним і 1 білим) будемо називати діаграмою максимального роду.

Введемо наступні позначення.

$\mathfrak{I}_1^n$ – множина O -діаграм з одним чорним циклом; $\mathfrak{I}_{1,1}^n$ – множина O -діаграм максимального роду; $\mathfrak{I}_{1,1}^{n,i}$ – множина O -діаграм максимального роду, які само суміщаються при повороті на кут $\omega = 2i \cdot \pi / n$ (за годинниковою стрілкою).

S_n – симетрична група; CS_n – множина підстановок з S_n , які розкладаються в цикл довжини n ; $CS_n^* = \{b \in CS_n \mid \tau \circ b \in CS_n\}$, де $\tau = (1, 2, \dots, n) \in CS_n$;

$CS_{n,i} = \{b \in CS_n \mid b + i = b \bmod n\}$;

$CS_{n,i}^* = CS_{n,i} \cap CS_n^* = \{b \in CS_n^* \mid b + i = b \bmod n\}$.

3. Діаграми максимального роду.

В роботі [9] було встановлено, що кожену діаграму $D \in \mathfrak{I}_{1,1}^n$ можна ототожнити з певним циклом $b \in CS_n^*$. Там же встановлено й число діаграм максимального роду.

Нагадаємо основну ідею. Орієнтуємо коло діаграми проти руху годинникової стрілки. І нехай діаграма $D \in \mathfrak{I}_1^n$. Під обходом чорних дуг b , діаграми $D \in \mathfrak{I}_1^n$, починаючи з чорної дуги b_1 будемо розуміти послідовність номерів $b = (1, j_2, j_3, \dots, j_n)$ чорних дуг $(b_1, b_{j_2}, b_{j_3}, \dots, b_{j_n})$, які зустрічаються при слідуванні по єдиному чорному її циклу – рис. 2. Тоді кожен такий цикл $b \in CS_n$ однозначно визначає хорди діаграми $D(b) \in \mathfrak{I}_1^n$, а тому й саму діаграму, і навпаки.

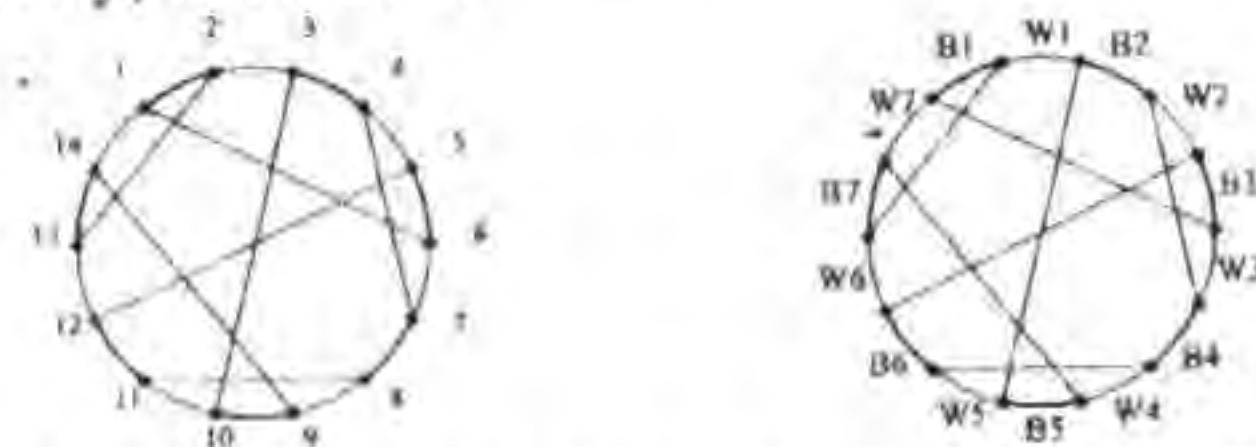


Рис. 2. $D = D(b) \leftrightarrow b = (b_1, b_{j_2}, b_{j_3}, b_{j_4}, b_{j_5}, b_{j_6}, b_{j_7}) \leftrightarrow b = (1, 3, 6, 4, 2, 5, 7)$.

З'ясуємо тепер питання, коли діаграма $D(b) \in \mathfrak{I}_1^n$ має один білий цикл.

Іншими словами, з'ясуємо за яких умов $D(b) \in \mathfrak{Z}_{1,1}^n$. Не важко перевірити, що якщо $b = (1, j_2, \dots, j_n) = \begin{pmatrix} 1 & j_2 & \dots & j_{n-1} & j_n \\ j_2 & j_3 & \dots & j_n & 1 \end{pmatrix} \in CS_n$ – обхід чорних дуг діаграми $D(b)$, то обхід w білих дуг цієї діаграми залежить від b , а саме:

$$w(b) = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & \dots & j_n & 1 \\ n & j_2 - 1 & \dots & j_{n-1} - 1 & j_n - 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Очевидно, що для довільного $b \in CS_n$ виконується рівність

$$b \circ w(b) = \begin{pmatrix} 1 & j_2 & \dots & j_{n-1} & j_n \\ n & j_2 - 1 & \dots & j_{n-1} - 1 & j_n - 1 \end{pmatrix} = (n, n-1, \dots, 2, 1) = \tau^{-1} \quad (2)$$

Таким чином, діаграма $D(b) \in \mathfrak{Z}_{1,1}^n$ за умов, коли $w(b) = (\tau \circ b)^{-1}$ є циклом довжини n . Більш того, $D(b) \in \mathfrak{Z}_{1,1}^n$ тоді і лише тоді коли $b \in CS_n^*$. Як наслідок з роботи [10] маємо, що для довільного парного n $|CS_n^*| = 0$, а для непарного n визначається за формулою

$$|CS_n^*| = |\mathfrak{Z}_{1,1}^{n,1}| = 2(n-1)!/(n+1) \quad (3)$$

Надалі діаграму $D(b) \in \mathfrak{Z}_{1,1}^n$ будемо ототожнювати з циклом $b \in CS_n^*$.

4 Число неізоморфних діаграм максимального роду.

Використовуючи результати роботи [7], не важко встановити, що циклічна група C_n , породжена елементом $\xi = (1, 2, \dots, n)$, діє на множині хордових діаграм $\mathfrak{Z}_{1,1}^n$ як спряження. Тобто, дві діаграми $D(b), D(b') \in \mathfrak{Z}_{1,1}^n$ ізоморфні тоді і лише тоді, коли існує таке $1 \leq m \leq n$, що $b' = \xi^{-m} \circ b \circ \xi^m$.

Тоді за лемою Бернсайда, та як наслідок з леми 3.1 [7], для довільного непарного n число неізоморфних O -діаграм максимального роду може бути обчислене за допомогою співвідношення

$$d_{\mathfrak{Z}_{1,1}^n} = \frac{1}{|C_n|} \left(|\mathfrak{Z}_{1,1}^n| + \sum_{i=1}^{n-1} \varphi\left(\frac{n}{i}\right) \cdot \rho(n, i) \right) = \frac{1}{n} \left(\frac{2(n-1)!}{n+1} + \sum_{i=1}^{n-1} \varphi\left(\frac{n}{i}\right) \cdot \rho(n, i) \right), \quad (4)$$

де $\varphi(q)$ – функція Ейлера (число натуральних менших q чисел взаємно простих з ним); $\rho(n, i) = |\{D(b) \in \mathfrak{Z}_{1,1}^n \mid b' = \xi^{-i} \circ b \circ \xi^i\}|$ – число всіх таких діаграм з $\mathfrak{Z}_{1,1}^n$, для яких перестановка ξ^i є автоморфізмом [7]. Іншими словами, $\rho(n, i)$ – це число тих діаграм з $\mathfrak{Z}_{1,1}^n$, які само суміщаються при повороті на кут $\omega = 2i \cdot \pi / n$ (за годинниковою стрілкою). Отже, згідно введених позначень, $\rho(n, i) = |\mathfrak{Z}_{1,1}^{n,i}|$.

Добре відомо, що дія елемента $\xi^i \in C_n$ на кожній підстановці $b = (j_1, \dots, j_n) \in CS_n$ за правилом $\xi^i : b \rightarrow \xi^{-i} \circ b \circ \xi^i$ еквівалентна операції додавання до кожного з j_l ($l = 1, \dots, n$) числа i за модулем n . Тобто $\xi^{-i} \circ b \circ \xi^i = b + i \pmod n$.

Зауваження 2. Так як $D(b) \in \mathfrak{Z}_{1,1}^{n,i} \Leftrightarrow b \in CS_{n,i}^*$, то для знаходження величини (4) достатньо підрахувати значення $\rho(n,i) = |\mathfrak{Z}_{1,1}^{n,i}| = |CS_{n,i}^*|$.

В роботі [9] встановлено, що для довільного простого n величина $\rho(n,1) = n - 2$. Узагальнимо цей результат на випадок довільного непарного n . Для цього ведемо в розгляд наступну функцію натурального аргументу.

Позначимо через $\varphi^*(n)$ кількість натуральних h менших за n та взаємно простих з ним, для яких числа $h+1$ також є взаємно простими з n . Тобто $\varphi^*(n) = |\{1 \leq h < n \mid \text{НСД}(h, n) = 1 = \text{НСД}(h+1, n)\}|$.

Очевидно, що $\varphi^*(n) = 0$ для парних n . Легко впевнитися в тому, що для довільного простого n ця величина рівна $\varphi^*(n) = n - 2$, так як кожна з пар $\{h, h+1\}$ $h = 1, 2, \dots, n-2$ задовольняє вказаним умовам. Заради визначеності покладемо $\varphi^*(1) = 1$. Відомо (див. напр. [11]), що функція $\varphi^*(n)$ є мультиплікативною і для будь якого непарного $n = p_1^{a_1} \cdot \dots \cdot p_k^{a_k}$ обчислюється за формулою

$$\varphi^*(n) = n \cdot \left(1 - \frac{2}{p_1}\right) \cdot \left(1 - \frac{2}{p_2}\right) \cdot \dots \cdot \left(1 - \frac{2}{p_k}\right) \quad (5)$$

Лема 1. Для довільного непарного n величина $\rho(n,1) = \varphi^*(n)$.

Доведення. Нехай $D(b) \in \mathfrak{Z}_{1,1}^{n,1}$. Тоді:

- 1) Так як $b \in CS_n$, то b має вид $b = (1, j_2, \dots, j_n)$.
- 2) Так як $b \in CS_n$, то $b+1 = b$. Тому циклу b належить кожна з впорядкованих пар: $\{1, j_2\}, \{2, j_2+1\}, \dots, \{j_2, 2j_2-1\}, \dots, \{2j_2-1, 3j_2-2\}, \dots$.
Отже, цикл b має вид $b = (1, 1+h, 1+2h, \dots, 1+(k-1)h)$, де $h = j_2 - 1$ – крок, з яким відбувається обхід чорних дуг єдиного чорного циклу діаграми $D(b)$.
- 3) Зрозуміло, що $b \in CS_{n,1}$ тоді і лише тоді коли h є взаємно простим з n . Однак, не при кожному такому h цикл $b \in CS_{n,1}^*$. Так, наприклад, при $h = n-1$, $w(b) \notin CS_n$ а відповідна діаграма має n білих циклів.
- 4) Так як $w = w(b) \in CS_n$, то цикл w можна подати в виді $w = (j_2, n, r_1, \dots, r_n)$. Тоді, за пунктами 2) і 3), цикл w має вид $w = (1, 1+h', 1+2h', \dots, 1+(k-1)h')$, де $h' = n - j_2$ (– крок, з яким відбувається обхід білих дуг єдиного білого циклу діаграми $D(b)$) і є взаємно простим з n .
- 5) Так як $h+1 = j_2$, то $h' = n - 1 - h$. Добре відоме, що число $1 \leq h' < n$ є взаємно простим з деяким непарним n тоді і лише тоді коли взаємно простим з n є число $n - h'$. В нашому випадку $n - h' = h + 1$.

Отже, $b \in CS_{n,1}^* \Leftrightarrow \begin{cases} b = (1, 1+h, 1+2h, \dots, 1+(k-1)h) \\ \text{НСД}(h, n) = 1 = \text{НСД}(h+1, n) \end{cases}$. А тому $\rho(n,1) = \varphi^*(n)$.

Наслідок 1. Для довільного простого n число неізоморфних 2-кольорових O -діаграм максимального роду може бути обчислене за формулою:

$$d_{2,1} = \frac{1}{n} \left(\frac{2(n-1)!}{n+1} + \varphi(n) \cdot \varphi^*(n) \right) = \frac{1}{n} \left(\frac{2(n-1)!}{n+1} + (n-1) \cdot (n-2) \right).$$

5. Основна частина

Лема 2. Нехай $b \in CS_{n,i}$, $n = i \cdot k$. Тоді цикл b має вид

$$b = (j_2, j_3, \dots, j_i, 1, j_2 + hi, j_3 + hi, \dots, j_i + hi, 1 + hi, \dots, j_2 + (k-1)hi, \dots, j_i + (k-1)hi, 1 + (k-1)hi) = \\ = ([b_1], [b_{1+h}], [b_{1+2h}], \dots, [b_{1+(k-1)h}]), \quad (6)$$

де $j_r \neq j_p \quad \forall r \neq p$, $[b_{1+qh}] = \{j_2 + qi, j_3 + qi, \dots, j_i + qi, 1 + qi\}$ – послідовність впорядкованих чисел, $q = 1, 2, \dots, k$, а $h \in \{1, \dots, k-1\}$ – деяке число взаємно просте з k . Арифметичні дії слід розуміти як такі, що виконуються за модулем n .

В подальшому послідовності $[b_{1+qh}]$ будемо називати чорними блоками. У випадку $b \in CS_{n,i}^*$ аналогічної термінології будемо дотримуватись для циклу $w(b) \in CS_{n,i}$. Нехай $b \in CS_{n,i}^*$. Тоді цикл b можна подати у вигляді (6): $b = (j_2, \dots, j_{i-1}, j_i, j_{i+1}, \dots, j_i, 1, j_2 + hi, \dots, j_{i-1} + hi, j_i + hi, j_{i+1} + hi, \dots, j_i + hi, 1 + hi, \dots, j_2 + (k-1)hi, \dots, j_{i-1} + (k-1)hi, j_i + (k-1)hi, j_{i+1} + (k-1)hi, \dots, j_i + (k-1)hi, 1 + (k-1)hi)$. Покладемо $\alpha^m(j_i) = (j_i, j_i + hi, j_i + 2hi, \dots, j_i + (k-1)hi)^m$, $m = 1, \dots, k$. Очевидно, що $\alpha^m(j_i) = \alpha^{k-m}(j_i)$. Числа $j_i, j_i + hi, j_i + 2hi, \dots, j_i + (k-1)hi$ будемо називати елементами однієї серії або ж елементами однакової позиції i . Нехай далі $b^* = \alpha^{-m}(j_i) \circ b \circ \alpha^m(j_i)$. Зрозуміло, що $b^* \in CS_{n,i}$. Більш того, b^* одержується з b в результаті циклічної перестановки елементів $j_i, j_i + hi, j_i + 2hi, \dots, j_i + (k-1)hi$ однієї серії (зсув кожного з них на im позицій «ліворуч» або ж на $i(k-m)$ позицій «праворуч»).

Не важко перевірити справедливості рівності

$$b^* = \alpha^{-m}(j_i) \circ b \circ \alpha^m(j_i) = b \circ \alpha^m(j_i) \circ \alpha^{-m}(j_{i+1}) \quad (7).$$

Теорема 1. Нехай $n = i \cdot k$ – деяке непарне натуральне число. Тоді для довільного $1 \leq m \leq k$ і будь якої позиції $1 \leq l \leq i$ $b^* \in CS_{n,i}^*$ тоді і лише тоді коли $b \in CS_{n,i}^*$.

Доведення. Для доведення достатньо показати, що $w^*(b^*) \in CS_{n,i}$ тоді і лише тоді коли $w(b) \in CS_{n,i}$. Покажемо, що $w^*(b^*)$ та $w(b)$ спряжені як підстановки. Отже, нехай $b \in CS_{n,i}^*$ має вид (6). Тоді, згідно (1),

$$w(b) = (\tau \circ b)^{-1} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_{i+1} & 1 & j_2 + hi & j_2 + hi \\ j_2 - 1 & j_{i+1} - 1 & j_1 - 1 & j_i - 1 & n & j_2 - 1 + hi \end{pmatrix}$$

$$\left. \begin{array}{ccccccc} j_1 + hi & j_{i+1} + hi & 1 + hi & j_i + 2hi & \dots & j_2 & \\ j_{i+1} - 1 + hi & j_i - 1 + hi & \dots & j_i - 1 + hi & hi & & \\ j_1 + (k-1)hi & j_1 + (k-1)hi & j_{i+1} + (k-1)hi & 1 + (k-1)hi & & j_2 & \\ j_2 - 1 + (k-1)hi & j_{i+1} - 1 + (k-1)hi & j_i - 1 + (k-1)hi & j_i - 1 + (k-1)hi & (k-1)hi & & \end{array} \right\}.$$

Так як $w(b) \in CS_{n,i}$, то зрозуміло, що його можна подати у вигляді $w = ([w_1], [w_{1+h}], [w_{1+2h}], \dots, [w_{1+(k-1)h}])$, де $1 \leq h' < k$ – натуральне, взаємно просте з k .

Визначимо білий блок $[w_1]$ наступним чином. А саме, розпочнемо обхід білих дуг єдиного білого циклу (відповідної діаграми максимального роду) з дуги j_i . Зрозуміло, що за нею слідуватиме дуга $j_{i+1} - 1$. Продовжуючи обхід білих дуг далі ми обов'язково зустрінемо дугу, номер якої належить числам $j_{i+1}, j_{i+1} + hi, \dots, j_{i+1} + (k-1)hi$ однієї серії. Через те що $\text{НСД}(h', k) = 1$, то знайдеться таке $1 \leq d' \leq k$, що число $j_{i+1} + d'h'i$ буде першим яке ми зустріли. Зрозуміло, що за ним слідуватиме число $j_i - 1 + d'h'i$. Так як $w(b) \in CS_{n,i}$, то існують такі послідовності впорядкованих чисел $\{r_3, r_4, \dots, r_p\}, \{r_{p+3}, \dots, r_i\}$, що $[w_1] = \{j_i, j_{i+1} - 1, r_3, \dots, r_p, j_{i+1} + d'h'i, j_i - 1 + d'h'i, r_{p+3}, \dots, r_i\}$, а тому цикл $w(b)$ можна подати в виді:

$$w(b) = (j_i, j_{i+1} - 1, R_{3,p}^1, j_{i+1} + d'h'i, j_i - 1 + d'h'i, R_{p+3,i}^1, j_i + h'i, j_{i+1} - 1 + h'i, R_{3,p}^2, j_{i+1} + (d'+1)h'i, j_i - 1 + (d'+1)h'i, R_{p+3,i}^2, \dots, j_i + (k-1)h'i, j_{i+1} - 1 + (k-1)h'i, R_{3,p}^k, j_{i+1} + (d'-1)h'i, j_i - 1 + (d'-1)h'i, R_{p+3,i}^k) \quad (8)$$

Тут $R_{3,p}^q = \{r_3^q, \dots, r_p^q\}$, $R_{p+3,i}^q = \{r_{p+3}^q, \dots, r_i^q\}$, $r_j^q = r_j + (q-1)h'i$, $q = 1, \dots, k$.

Зауваження 3. Якщо $b \in CS_{n,i}^*$, то $w(b)$ не може містити впорядкованої пари $\{j_i, j_i - 1 + d'h'i\}$. Тобто, між цими елементами завжди знаходиться ще принаймні один елемент. В протилежному випадку цикл $b \in CS_{n,i}$ містив би впорядковану пару $\{j_i + d'h'i, j_i\}$. А так як $(h, k) = 1 = (h', k)$, то знайдеться таке $1 \leq d \leq k$, що $d'h'i = dhi$. Звідки слідує, що b містить впорядковану пару $\{j_i + dhi, j_i\}$. Чого бути не може через те що $b \in CS_{n,i}$ і між елементами $j_i + dhi, j_i$ (однієї серії) знаходиться принаймні $i-1$ елементів. Випадок $i=1$ був розглянутий раніше (лема 1).

Так як $w(b) + i = w(b)$, то $\forall m \in \{1, \dots, k\} \quad w(b) + (k-m)hi = w(b)$. Так як $(h, k) = 1 = (h', k)$, то існує єдине таке $1 \leq m^* \leq k$, що $(k-m)h = m^*h' \pmod k$. А тому $w(b)$ (8) має вид:

$$w(b) = (j_i + (k-m)hi, j_{i+1} - 1 + m^*h'i, R_{3,p}^{1+m^*}, j_{i+1} + (d'+m^*)h'i, j_i - 1 + (d'h' + (k-m)h)i, R_{p+3,i}^{1+m^*}, \dots, j_i + ((q-1)h' + (k-m)h)i, j_{i+1} - 1 + (m^* + q - 1)h'i, R_{3,p}^{q+m^*}).$$

$$\begin{aligned}
 & j_{i+1} + (d' + q - 1 + m^*)h'i, j_i - 1 + ((d' + q - 1)h' + (k - m)h)i, R_{p+3,i}^{q+m^*}, \\
 & j_i + (qh' + (k - m)h)i, j_{i-1} - 1 + (m^* + q)h'i, R_{3,p}^{q+1+m^*}, \\
 & j_{i+1} + (d' + q + m^*)h'i, j_i - 1 + ((d' + q)h' + (k - m)h)i, R_{p+3,i}^{q+1+m^*}, \dots \\
 & j_i + ((k - 1)h' + (k - m)h)i, j_{i-1} - 1 + (m^* + k - 1)h'i, R_{3,p}^{k+m^*}, \\
 & j_{i+1} + (d' + k - 1 + m^*)h'i, j_i - 1 + ((d' + k - 1)h' + (k - m)h)i, R_{p+3,i}^{k+m^*} \Big) \quad (9)
 \end{aligned}$$

Так як $\forall b \quad b \circ w(b) = \tau^{-1}$ то, враховуючи (7), $w^*(b^*) = \alpha^{-m}(j_i) \circ \alpha^m(j_{i+1}) \circ w(b)$. Не важко також перевірити, що $\alpha^m(j_{i+1}) \circ w(b) = w(b) \circ \alpha^m(j_i - 1)$.

А тому $w^*(b^*) = \alpha^{-m}(j_i) \circ w(b) \circ \alpha^m(j_i - 1)$. Звідки:

$$\begin{aligned}
 w^* = & (j_i, j_{i-1} - 1 + m^*h'i, R_{3,p}^{1+m^*}, j_{i+1} + (d' + m^*)h'i, j_i - 1 + d'h'i, R_{p+3,i}^1, \\
 & j_i + h'i, j_{i-1} - 1 + (m^* + 1)h'i, R_{3,p}^{2+m^*}, j_{i+1} + (1 + d' + m^*)h'i, j_i - 1 + (1 + d')h'i, R_{p+3,i}^2, \dots \\
 & j_i + (k - 1)h'i, j_{i-1} - 1 + (m^* - 1)h'i, R_{3,p}^{k+m^*}, j_{i+1} + (k - 1 + d' + m^*)h'i, j_i - 1 + (d' - 1)h'i, R_{p+3,i}^k) \quad (10)
 \end{aligned}$$

Порівнюючи $w(b)$ (8) і w^* (10) не важко впевнитись, що w^* одержується з $w(b)$ в результаті циклічної перестановки (зсуву на $i(k - m^*)$ позицій «праворуч») елементів декількох серій. А саме:

$$\begin{aligned}
 w^*(b^*) = & \alpha^{m^*}(j_{i+1} + d'h'i) \circ \alpha^{m^*}(r_p) \circ \dots \circ \alpha^{m^*}(r_3) \circ \alpha^{m^*}(j_{i-1} - 1) \circ w \circ \\
 & \circ \alpha^{k-m^*}(j_{i-1} - 1) \circ \alpha^{k-m^*}(r_3) \circ \dots \circ \alpha^{k-m^*}(r_p) \circ \alpha^{k-m^*}(j_{i+1} + d'h'i) = Q^{-1} \circ w(b) \circ Q.
 \end{aligned}$$

Тут $\alpha^i(s) = (s, s + h'i, s + 2h'i, \dots, s + (k - 1)h'i)^i$.

За припущенням $w(b) \in CS_{n,i}^*$, а тому $w^* = Q^{-1} \circ w(b) \circ Q$ – цикл довжини n . Більш того, для фіксованого $b \in CS_{n,i}^*$, довільного $1 \leq m \leq k$ і будь якої позиції $1 \leq l \leq i$ підстановка $w^*(b^*) \in CS_{n,i}$ тоді і лише тоді коли $w(b) \in CS_{n,i}^*$.

Наслідок 2. Довільний цикл $b \in CS_{n,i}^*$ (разом з собою) визначає в точності $(k)^{i-1} = (n/i)^{i-1}$ різних циклів з множини $CS_{n,i}^*$. Більш того, в довільному циклі $b \in CS_{n,i}^*$ завжди можна циклічно переставити елементи декількох серій і отримати такий цикл $\bar{b} = ([b_1], [b_{1+h}], [b_{1+2h}], \dots, [b_{1+(k-1)h}]) \in CS_{n,i}^*$, для якого $[b_1] = \{j_1, j_2, \dots, j_i, 1\}$ складається виключно з чисел множини $\{1, 2, \dots, i\}$.

В подальшому множину таких циклів $\bar{b}$ позначатимемо через $\overline{CS_{n,i}^*}$.

Зауваження 4. $\rho(n, i) = |CS_{n,i}^*| = |\overline{CS_{n,i}^*}| \cdot \left(\frac{n}{i}\right)^{i-1}$.

Лема 3. Нехай $\bar{b} \in \overline{CS_{n,i}^*}$. Тоді $b = (j_2^*, j_3^*, \dots, j_i^*, 1) \in CS_i^*$.

Доведення. Припустимо обернене. А саме: нехай $b \in CS_i$ але $b \notin CS_i^*$. Тоді,

згідно зауваження 1, відповідна діаграма $D(b)$ має принаймні три білі цикли. Не втрачаючи загальності, можна вважати, що $D(b)$ має саме три білі цикли w^1, w^2, w^3 . Розріжемо коло діаграми $D(b)$ по білій дузі w_1 – рис. 3 A) та видалимо хорду $[1, 2j_2]$, яка з'єднує чорні дуги з номерами 1 і j_2 . Так як $\{j_2, j_3, \dots, j_i, 1\} \in \bar{b}$, то очевидно, що отримана конструкція – рис. 3 B) є частиною хордової діаграми $D(\bar{b})$ (рис. 3 C)).

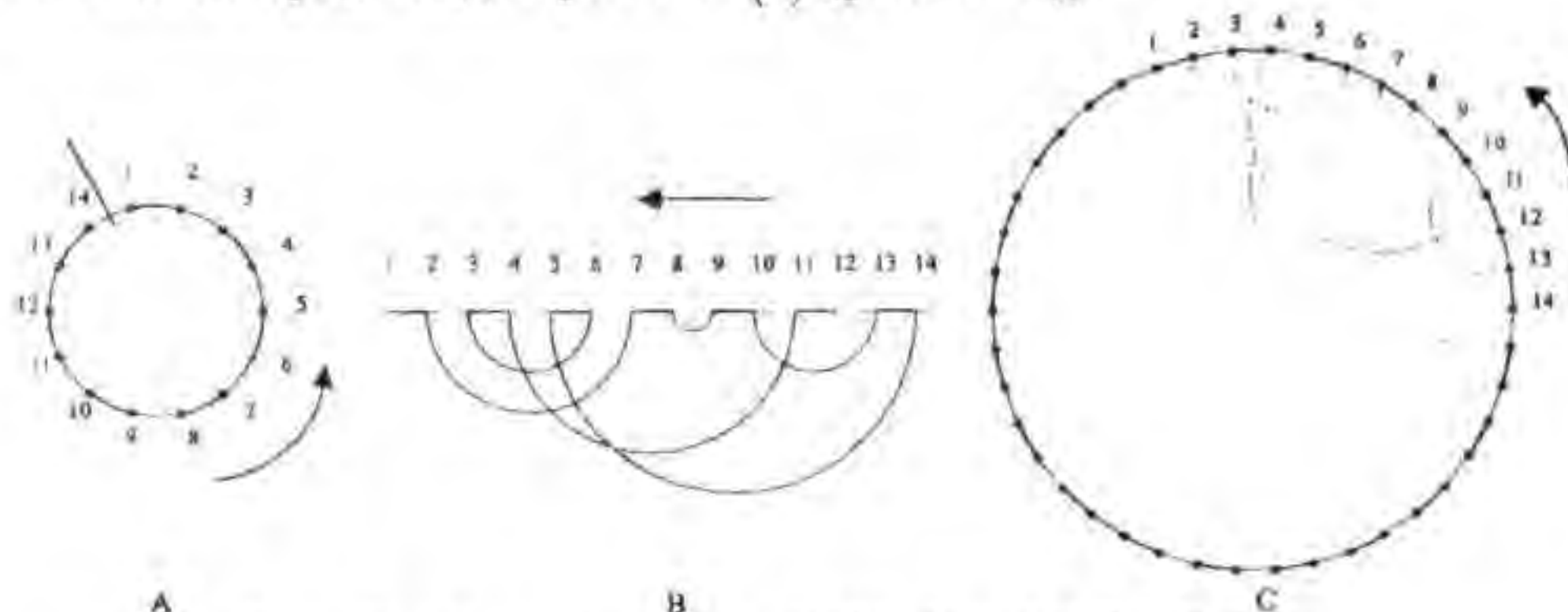


Рис. 3. A) – діаграма $D(b)$, $b = (1, 6, 2, 3, 7, 5, 4)$;

Розглянемо два випадки:

1) нехай $j_2 = i$, тоді один з трьох білих циклів, наприклад w^1 , має вид $w^1 = (i)$. Після розрізання діаграми $D(b)$ по дузі w_1 та видалення хорди $[1, 2i]$ цикл $w^1 = (i)$ розпадеться, а два інших – w^2, w^3 будуть співпадати з білими циклами діаграми $D(\bar{b})$.

2) Нехай $j_2 \neq i$. Тоді один з трьох білих циклів, наприклад w^1 , має вид $w^1 = (i, \dots, j_2)$. Після розрізання діаграми $D(b)$ по дузі w_1 та видалення хорди $[1, 2j_2]$ цикл w^1 розпадеться, а підстановка $w(\bar{b})$ міститиме послідовність $\{i, \dots, j_2\}$. Два інших цикли w^2, w^3 знову будуть співпадати з білими циклами діаграми $D(\bar{b})$. Таким чином, на проміжку $\langle 1, 2, \dots, 2i \rangle$ діаграма $D(\bar{b})$ має, принаймні, два білих цикли. А тому $D(\bar{b})$ не є діаграмою максимального роду, звідки $\bar{b} \notin CS_{n,i}^*$. Отримали протиріччя.

Лема 4. Для довільного непарного $n = i \cdot k$

$$|\overline{CS_{n,i}^*}| = \frac{2(i-1)!}{i+1} \cdot \varphi^*\left(\frac{n}{i}\right) = |CS_i^*| \cdot \varphi^*\left(\frac{n}{i}\right).$$

Доведення. Нехай $i > 1$, k – деякі непарні числа, а $n = i \cdot k$. Покажемо, що кожен цикл $b \in CS_i^*$, в певному сенсі, визначає в точності $\varphi^*(k) = \varphi^*(n/i)$ різних циклів з множини $\overline{CS_{n,i}^*}$.

Наведемо алгоритм, слідуючи якому, за кожним $b \in CS_i^*$ можна утворити певний цикл $\bar{b} \in \overline{CS_{n,i}^*}$. Отже, нехай $b \in CS_i^*$. Тоді цикл b можна подати у

вигляді $b = (j_2, j_3, \dots, j_i, 1)$. А цикл $w(b)$, згідно (1), можна записати наступним чином $w(b) = (i, r_3, \dots, r_i, j_2)$.

Утворимо наступні впорядковані послідовності чисел:

$$[b_1] = \{j_2, j_3, \dots, j_i, 1\}, [b_{1+q}] = \{j_2 + qi, j_3 + qi, \dots, j_i + qi, 1 + qi\}, q = 1, 2, \dots, k,$$

$$[w_1] = \{i, r_3, \dots, r_i, j_2\}, [w_{1+q}] = \{i + qi, r_3 + qi, \dots, r_i + qi, j_2 + qi\}, q = 1, 2, \dots, k.$$

Нехай $1 \leq h < k$ – деяке натуральне взаємно просте з k . Утворимо цикл $\bar{b} = ([b_1]_h^k)$ довжини $n = i \cdot k$, розмістивши чорні блоки наступним чином

$$\bar{b} = ([b_1], [b_{1+h}], [b_{1+2h}], \dots, [b_{1+(k-1)h}]) = \\ = (j_2, j_3, \dots, j_i, 1; \dots; j_2 + (k-1)hi, \dots, j_i + (k-1)hi, 1 + (k-1)hi).$$

Зрозуміло, що $\bar{b} \in CS_{n,i}$. А h є кроком, з яким відбувається обхід чорних блоків циклу $\bar{b}$. З'ясуємо, за яких умов $\bar{w} = w(\bar{b}) \in CS_{n,i}$.

За побудовою підстановка $\bar{w} = w(\bar{b})$ (обхід білих дуг діаграми) містить $k = n/i$ впорядкованих послідовностей

$$[w_{1+q}] = \{i + qi, r_3 + qi, \dots, r_i + qi, j_2 + qi\}, q = 1, \dots, k - \text{білих блоків.}$$

Так як циклу $\bar{b}$ належить кожна з впорядкованих пар

$$\{1, j_2 + hi\}, \{1 + hi, j_2 + 2hi\}, \dots, \{1 + (k-2)hi, j_2 + (k-1)hi\}, \{1 + (k-1)hi, j_2\},$$

то, згідно (1), $\bar{w} = w(\bar{b})$ містить кожен з наступних впорядкованих пар:

$$\{j_2 + hi, n\}, \{j_2 + 2hi, hi\}, \dots, \{j_2 + (k-1)hi, (k-2)hi\}, \{j_2, (k-1)hi\} (*).$$

Так як $j_2 \in [w_1]$, а $(k-1)hi = (k-h)i \in [w_{k-h}]$, то $w(\bar{b}) = ([w_1], [w_{k-h}], \dots)$.

Проводячи аналогічні міркування для решти впорядкованих пар (*), не важко встановити, що за умов взаємної простоти числа $h' = k - h - 1$ з k , $w(\bar{b})$ набуде вигляду $w(\bar{b}) = ([w_1], [w_{1+h'}], [w_{1+2h'}], \dots, [w_{1+(k-1)h'}])$ і належатиме $CS_{n,i}$. А отримане число $h' = k - 1 - h$ є саме тим кроком, з яким відбувається обхід білих блоків діаграми $D(\bar{b})$.

Зрозуміло, що h' є взаємно простим з непарним k тоді і лише тоді, коли взаємно простим з k є число $k - h' = h + 1$. І тоді очевидно, що існує тільки $\varphi^*(k) = \varphi^*(n/i)$ можливостей утворити цикл $\bar{b} \in \overline{CS_{n,i}^*}$.

Таким чином, кожен цикл $b \in CS_i^*$ визначає в точності $\varphi^*(n/i)$ різних циклів $\bar{b} \in \overline{CS_{n,i}^*}$. А так як кожному $b \in CS_i^*$ за єдиним правилом ставиться у відповідність своя, унікальна, послідовність $[b_1]$, то, застосовуючи наведений алгоритм до кожного $b \in CS_i^*$, отримаємо в точності $2(i-1)!/(i+1) \cdot \varphi^*(n/i)$ різних циклів з множини $\overline{CS_{n,i}^*}$. За лемою 3, циклами, побудованими в такий спосіб, вичерпується вся множина $\overline{CS_{n,i}^*}$.

А тому $|\overline{CS_{n,i}^*}| = 2(i-1)!/(i+1) \cdot \varphi^*(n/i)$.

Теорема 2 (основна) Для довільного непарного n число неізоморфних O -діаграм максимального роду $g = (n-1)/2$ може бути обчислене за

допомогою співвідношення $d_{\frac{n}{2},1} = \frac{1}{n} \left(\frac{2(n-1)!}{n+1} + \sum_{i=1, i \neq n} \varphi\left(\frac{n}{i}\right) \cdot \rho(n,i) \right)$, де

$$\rho(n,i) = \frac{2(i-1)!}{i+1} \cdot \varphi^*(n/i) \cdot (n/i)^{i-1}, \text{ а } \varphi^*(q) \text{ визначається за формулою (5).}$$

Доведення твердження є наслідком (4), зауваження 4 та леми 4.

g	0	1	2	3	4	5	6	7
$n = 2g + 1$	1	3	5	7	9	11	13	15
$d_{\frac{n}{2},1}$	1	1	4	30	900	54 990	5 263 764	726 485 868

Таблиця 1. Початкові значення числа неізоморфних діаграм максимального роду.

Література

1. Fleitas G. Classification of Gradient like flows on dimensions two and three // Bol. Soc. Brasil. Mat.- v.6, 1975.- P.155-183.
2. Girik.E Classification of polar Morse-Smale vector fields on two-dimensional manifolds // Methods Funct. Anal. Topology 2 (1996), no. 1, 23--37.
3. Poltavec D. Equivalent polar Morse-Smale systems on two dimensional manifolds of genus 3 // Abstract of International Conference on Topology and its Applications, Kiev, 1995.-p.29.
4. Ошемков А.А. Функции Морса на двумерных поверхностях. Кодирование особенностей // ТР. МИРАН.- 1994 - 205. С.131-140.
5. Шарко В.В. Гладкая и топологическая эквивалентность функций на поверхностях // Укр. мат. жур. - 2003. - 55, № 5 - С.687-700.
6. Stoimenov A. On the number of chord diagrams // Discrete Math. – 2000.- vol. 218. no. 1-3 – p. 209-233.
7. R. Cori, M. Marcus. Counting non-isomorphic chord diagrams.// Theoretical Computer Science – 1998. – no. 204. – p. 55-73.
8. Khruzin A. Enumeration of chord diagrams.//Arxiv: math. CO/0008209, 10 p.
9. Кадубовський О. Топологічна еквівалентність функцій на орієнтованих поверхнях // Укр. мат. жур. (в друці).
10. Prishlyak A.O. Topological equivalence of smooth functions with isolated critical points on a closed surface.// Top. and its Aplic.-2002.-119.-p.257-267.
11. A. Vella. Pattern avoidance in permutations: linear and cyclic orders // The electronic journal of combinatorics 10 (2003).
12. Boccara G. Nombre de representations d'une permutation comme produit de deux cycles de longueurs donnees. Discrete Math. 29 (1980), no. 2, 105-134.
13. V. Jovovic On-Line Enc. of Integer Seq., published electronically at: <http://www.research.att.com/projects/OEIS?Anum=A058026>

Надійшла до редакції 2.09.2005

УДК 512.643.2

Іван І. Кирчей*

Правило Крамера над кватерніоною алгеброю з діленням для Вісника Київського університету. Серія: фізико-математичні науки

В даній роботі одержано узагальнення правила Крамера для систем лінійних рівнянь над тілом, що є кватерніоною алгеброю з діленням над полем нульової характеристики.

Ключові слова: кватерніонова алгебра, некомутативний визначник, правило Крамера.

*E-mail: kyrchei@lms.lviv.ua

Ivan I. Kyrchei*

Cramer's rule over the quaternion division algebra for Bulletin of the University of Kiev. Series: Physics & Mathematics

The generalization of Cramer's rule for systems of linear equations over a skew field, which is the quaternion division algebra over a field of zero characteristic, is being obtained in the paper.

Key Words: quaternion algebra, noncommutative determinant, Cramer's rule.

Розв'язок систем лінійних рівнянь над тілом методом аналогічним правилу Крамера розглядався в роботах [1, 2] у рамках теорії квазідетермінантів та [3, 4] – засобом n -порядкового некомутативного визначника Л. Чена. В даній роботі правило Крамера для систем лінійних рівнянь над тілом S з інволюцією, що є кватерніоною алгеброю над своїм центром – полем F нульової характеристики, розглядається в рамках розробленої [5, 6] теорії стовпцевих та рядкових визначників. Отримане узагальнення правила Крамера для правих та лівих систем лінійних рівнянь над тілом має більш близьку аналогію з комутативним випадком. В цій роботі подаються повні означення стовпцевих та рядкових визначників, їх основні властивості, теореми про визначникове зображення оберненої матриці над тілом через її класичну приєднану та теореми, що розкривають правило Крамера для систем лінійних рівнянь над кватерніоною F -алгеброю S . Зокрема, якщо $F \equiv \mathbb{R}$ – поле дійсних чисел, то $S \equiv \mathbb{H}_{\mathbb{R}}$ – тіло дійсних кватерніонів, якщо ж $F \equiv \mathbb{Q}$ – поле раціональних чисел, то $S \equiv \mathbb{H}_{\mathbb{Q}}$ – тіло раціональних кватерніонів.

Означення 1. Нехай S_n – симетрична група. Будемо говорити, що підстановка $\sigma \in S_n$ записана прямим добутком незалежних циклів, якщо її запис в звичайній формі відповідає її розкладу в незалежні цикли. Тобто, якщо в нормальній формі підстановка σ записується як

$$\sigma = (n_{11} n_{12} \dots n_{1l_1}) (n_{21} n_{22} \dots n_{2l_2}) \dots (n_{r1} n_{r2} \dots n_{rl_r}), \quad (1)$$

то її запис прямим добутком незалежних циклів має вигляд

$$\sigma = \begin{pmatrix} n_{11} & n_{12} & \dots & n_{1l_1} \\ n_{12} & n_{13} & \dots & n_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_{21} & n_{22} & \dots & n_{2l_2} \\ n_{22} & n_{23} & \dots & n_{21} \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} n_{r1} & n_{r2} & \dots & n_{rl_r} \\ n_{r2} & n_{r3} & \dots & n_{r1} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Означення 2. Будемо говорити, що нормальна форма підстановки $\sigma \in S_n$ є впорядкованою зліва, якщо елементи, що замикають кожен із її незалежних циклів записуються першими зліва у кожному з циклів. Тобто, якщо підстановка σ записана прямим добутком незалежних циклів має вигляд (2), то її впорядкована зліва нормальна форма записується як (1).

Означення 3. Будемо говорити, що нормальна форма підстановки $\sigma \in S_n$ є впорядкованою справа, якщо елементи, що замикають кожен із її незалежних циклів записуються першими справа у кожному з циклів. Тобто, якщо запис підстановки σ прямим добутком незалежних циклів має вигляд (2), то її впорядкована справа нормальна форма записується як

$$\sigma = (n_{12} \dots n_{1l_1} n_{11}) (n_{22} \dots n_{2l_2} n_{21}) \dots (n_{r2} \dots n_{rl_r} n_{r1}).$$

Означення 4. Рядковим визначником по i -му рядку квадратної матриці $A = (a_{ij})_{n \times n}$ над тілом S , $\text{rdet}_i A$, $(\forall i = 1, n)$, називається альтернативна сума $n!$ мономів, - усіх можливих добутків елементів матриці A взятих по одному з кожного рядка та стовпця i впорядкованих таким чином, що підстановка, $\sigma \in S_n$, індексів елементів кожного моному в звичайній формі записана прямим добутком незалежних циклів. І якщо підстановка парна, то моном береться з додатнім знаком, а якщо непарна - то з від'ємним.

Тобто,
$$\text{rdet}_i A = \sum_{\sigma \in S_n} (-1)^{n-r} a_{i i_{k_1}} a_{i_{k_1} i_{k_1+1}} \dots a_{i_{k_1+l_1} i} \dots a_{i_{k_r} i_{k_r+1}} \dots a_{i_{k_r+l_r} i_{k_r}}.$$

Впорядкована зліва нормальна форма підстановки σ має наступний вигляд: $\sigma = (i i_{k_1} i_{k_1+1} \dots i_{k_1+l_1}) (i_{k_2} i_{k_2+1} \dots i_{k_2+l_2}) \dots (i_{k_r} i_{k_r+1} \dots i_{k_r+l_r}).$

При цьому перший зліва цикл розпочинається зліва індексом i , а всі наступні незалежні цикли задовольняють умови:

$$i_{k_2} < i_{k_3} < \dots < i_{k_r}, \quad i_{k_r} < i_{k_r+s}, \quad (\forall l = 2, r), \quad (\forall s = 1, l_l).$$

Нехай A^{ij} - підматриця матриці A , яку одержимо, викресливши її i -й рядок та j -й стовпець. Позначимо через $a_{\cdot j}$ - j -й стовпець, а через $a_{i \cdot}$ - i -й рядок матриці A . І нехай $A_{\cdot j}(b)$ - матриця, яку одержимо з матриці A заміною її j -го стовпця стовпцем b , а $A_{i \cdot}(b)$ - матриця, яку одержимо з A , замінивши її i -й рядок рядком b . Через $\bar{M}(n, S)$ позначатимемо кільце квадратних матриць n -го порядку над тілом S .

Лема 1. [5] Нехай R_{ij} - праве алгебричне доповнення елемента a_{ij}

матриці $A \in \bar{M}(n, S)$, тобто $\text{rdet}_i A = \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot R_{ij}$. Тоді

$$R_{ij} = \begin{cases} -\text{rdet}_j A_{\cdot j}^{ii}(\mathbf{a}_{\cdot i}), & \text{якщо } i \neq j, \\ \text{rdet}_k A^{ii}, & \text{якщо } i = j, \end{cases}$$

де $A_{\cdot j}^{ii}(\mathbf{a}_{\cdot i})$ - матриця, яку одержимо з матриці A , спочатку замінивши її j -й стовпець - i -м, а потім викресливши i -й рядок та стовпець, $k = \min\{J_n \setminus \{i\}\}$.

Означення 5. Стовпцевим визначником по j -му стовпцю квадратної матриці $A = (a_{ij})_{n \times n}$ над тілом S , $\text{cdet}_j A$, $(\forall j = \overline{1, n})$, називається альтернативна сума $n!$ мономів, - усіх можливих добутків елементів матриці A взятих по одному з кожного рядка та стовпця і впорядкованих таким чином, що підстановка, $\tau \in S_n$, індексів елементів кожного моному в звичайній формі записана прямим добутком незалежних циклів. І якщо підстановка парна, то моном береться з додатнім знаком, а якщо непарна - то з від'ємним. Тобто,

$$\text{cdet}_j A = \sum_{\tau \in S_n} (-1)^{n-r} a_{j_{k_r} j_{k_r+l_r}} \cdots a_{j_{k_{r+1}} j_{k_{r+1}+l_{k_r}}} \cdots a_{j_{k_1+l_1} j_{k_1}} \cdots a_{j_{k_1+l_1} j_{k_1}} a_{j_{k_1} j}.$$

Впорядкована справа нормальна форма підстановки τ має наступний вигляд: $\tau = (j_{k_r+l_r} \cdots j_{k_r+1} j_{k_r}) \cdots (j_{k_2+l_2} \cdots j_{k_2+1} j_{k_2}) (j_{k_1+l_1} \cdots j_{k_1+1} j_{k_1} j)$.

При цьому перший справа цикл розпочинається справа індексом j , а всі наступні незалежні цикли задовольняють умови:

$$j_{k_2} < j_{k_3} < \cdots < j_{k_r}, j_{k_t} < j_{k_t+s}, (\forall t = \overline{2, r}), (\forall s = \overline{1, l_t}).$$

Тут S_n симетрична група на множині $J_n = \{1, 2, \dots, n\}$.

Справедливою є наступна лема, яка дає змогу розкласти стовпцевий визначник $\text{cdet}_j A$ за елементами j -го рядка.

Лема 2. [5] Нехай L_{ij} - ліве алгебричне доповнення елемента a_{ij} матриці $A \in M(n, S)$, тобто,

$$\text{cdet}_j A = \sum_{i=1}^n L_{ij} \cdot a_{ij}, \quad (3)$$

Тоді

$$L_{ij} = \begin{cases} -\text{cdet}_i A_{\cdot i}^{jj}(\mathbf{a}_{\cdot j}), & \text{якщо } i \neq j, \\ \text{cdet}_k A^{jj}, & \text{якщо } i = j, \end{cases}$$

де $A_{\cdot i}^{jj}(\mathbf{a}_{\cdot j})$ - матриця, яку одержимо з матриці A , спочатку замінивши її i -й рядок j -м рядком, а потім викресливши j -й рядок та стовпець, $k = \min\{J_n \setminus \{j\}\}$.

Ключове значення в теорії стовпцевих та рядкових визначників відіграє наступна теорема.

Теорема 1. [5] Нехай $A \in M(n, S)$ - ермітова матриця, тоді $\text{rdet}_1 A = \dots = \text{rdet}_n A = \text{cdet}_1 A = \dots = \text{cdet}_n A \in F$.

Зауваження 1. Для ермітової матриці $A \in M(n, S)$ в силу теореми 1 можемо однозначно ввести поняття визначника матриці, який будемо розкривати як рядковий по будь-якому рядку або як стовпцевий по будь-якому стовпцю матриці, $\det A := \text{rdet}_i A = \text{cdet}_i A$, $(\forall i = \overline{1, n})$, де $A \in M(n, S)$ - довільна ермітова матриця над тілом S .

Для стовпцевих та рядкових визначників ермітових матриць над тілом S є справедливими наступні властивості:

Теорема 2. [5] Якщо i -й рядок ермітової матриці $A \in M(n, S)$ замінити лівою лінійною комбінацією її інших рядків, тобто, $a_{i, l} = c_1 \cdot a_{i_1, l} + \dots + c_k \cdot a_{i_k, l}$, де $i_k \in I_n$, $c_l \in S$ для $\forall l = \overline{1, k}$, тоді $\text{cdet } A_{i, l} (c_1 \cdot a_{i_1, l} + \dots + c_k \cdot a_{i_k, l}) = \text{rdet } A_{i, l} (c_1 \cdot a_{i_1, l} + \dots + c_k \cdot a_{i_k, l}) = 0$, $(\forall i = \overline{1, n})$.

Теорема 3. [5] Якщо j -й стовпець ермітової матриці $A \in M(n, S)$ замінити правою лінійною комбінацією її інших стовпців, тобто, $a_{i, j} = a_{i, j_1} \cdot c_1 + \dots + a_{i, j_k} \cdot c_k$, де $i_k \in I_n$, $c_l \in S$ для $\forall l = \overline{1, k}$, тоді $\text{cdet } A_{i, l} (a_{i, j_1} \cdot c_1 + \dots + a_{i, j_k} \cdot c_k) = \text{rdet } A_{i, l} (a_{i, j_1} \cdot c_1 + \dots + a_{i, j_k} \cdot c_k) = 0$, $(\forall i = \overline{1, n})$.

З властивостей стовпцевих та рядкових визначників ермітових матриць одержимо теорему про визначникове зображення матриці оберненої до ермітової та слідуючий за нею критерій виродженості матриці $A^* A$.

Теорема 4. [5] Для ермітової матриці $A \in M(n, S)$ такої, що $\det A \neq 0$, існує єдина права обернена матриця $(RA)^{-1}$ і єдина ліва обернена матриця $(LA)^{-1}$, і вони рівні між собою, $(RA)^{-1} = (LA)^{-1} =: A^{-1}$. При цьому якщо $(RA)^{-1} = (r_{ij})_{n \times n}$, а $(LA)^{-1} = (l_{ij})_{n \times n}$, тоді $r_{ij} = \frac{R_{ji}}{\det A}$ та

$l_{ij} = \frac{L_{ji}}{\det A}$, відповідно. Тут R_{ji} та L_{ji} , - відповідно, праве та ліве алгебричні доповнення елемента a_{ji} матриці A , $(\forall i, j = \overline{1, n})$.

Теорема 5. [6] Для того, щоб визначник ермітової матриці $A^* A$ дорівнював нулю, необхідно і достатньо, щоб стовпці матриці $A = (a_{ij})_{n \times n}$ над тілом S були лінійно залежними справа.

Має місце наступна теорема.

Теорема 6. [6] Нехай $A \in M(n, S)$, тоді $\det AA^* = \det A^* A$.

Означення 6. Для $A \in M(n, S)$ визначник $\det AA^*$ або $\det A^* A$ будемо називати її подвійним (double) визначником (позначатимемо його $\text{ddet } A$).

Означення 7. Для $A \in M(n, S)$ і $\forall j = \overline{1, n}$ $ddet A = cdet_j(A^* A) = \sum_{i=1}^n \odot_{ij} a_{ij}$,

тоді $\odot_{ij}$ будемо називати лівим подвійним алгебричним доповненням елемента a_{ij} матриці A .

Означення 8. Для $A \in M(n, S)$ і $\forall i = \overline{1, n}$ $ddet A = rdet_i(AA^*) = \sum_j a_{ij} \oslash_{ij}$,

тоді $\oslash_{ij}$ будемо називати правим подвійним алгебричним доповненням елемента a_{ij} матриці A .

Теорема 7. Для того, щоб $A \in M(n, S)$ була оборотною необхідно і достатньо, щоб $ddet A \neq 0$, тоді існують єдині її ліва обернена матриця $\exists! (LA)^{-1} = (A^* A)^{-1} A^*$ та права обернена $\exists! (RA)^{-1} = A^* (AA^*)^{-1}$ такі, що $(LA)^{-1} = (RA)^{-1} =: A^{-1}$. При цьому, якщо $(LA)^{-1} = (l_{ij})_{n \times n}$, а $(RA)^{-1} = (r_{ij})_{n \times n}$,

тоді $l_{ij} = \frac{\odot_{ji}}{ddet A}$ та $r_{ij} = \frac{\oslash_{ji}}{ddet A}$, відповідно, і для $\forall i, j = \overline{1, n}$

$$\odot_{ij} = cdet_j(A^* A)_{.j}(\mathbf{a}_{.i}^*), \quad (4)$$

$$\oslash_{ij} = rdet_i(AA^*)_{.i}(\mathbf{a}_{j.}^*), \quad (5)$$

Доведення. (Необхідність). Нехай $\exists A^{-1}$ для $\forall A \in M(n, S)$. Тоді $rank A \geq rank(A^{-1} A) = rank I = n$. Отже, стовпцевий $rank A = n$. Оскільки, $rank A = rank A^* A$, то стовпці ермітової матриці $A^* A$ лінійно незалежні справа і за теоремою 5 $det(A^* A) = ddet A \neq 0$.

(Достатність) Оскільки, $ddet A = det(A^* A) \neq 0$, то за теоремою 4 для ермітової $A^* A$ існує її обернена $(A^* A)^{-1}$. Домноживши її справа на матрицю A^* , одержимо ліву обернену до A , $(LA)^{-1} = (A^* A)^{-1} A^*$. Дійсно, $(LA)^{-1} A = (A^* A)^{-1} A^* A = I$. Розкриваючи $(A^* A)^{-1}$ як ліву обернену та використовуючи формулу (3), одержимо:

$$(LA)^{-1} = (L(A^* A))^{-1} A^* = \frac{1}{ddet A} \begin{pmatrix} \sum_k L_{k1} a_{k1}^* & \sum_k L_{k1} a_{k2}^* & \dots & \sum_k L_{k1} a_{kn}^* \\ \sum_k L_{k2} a_{k1}^* & \sum_k L_{k2} a_{k2}^* & \dots & \sum_k L_{k2} a_{kn}^* \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_k L_{kn} a_{k1}^* & \sum_k L_{kn} a_{k2}^* & \dots & \sum_k L_{kn} a_{kn}^* \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\text{ddet } A} \begin{pmatrix} \text{cdet}_1(A^*A)_{.1}(a_{.1}^*) & \text{cdet}_1(A^*A)_{.1}(a_{.2}^*) & \dots & \text{cdet}_1(A^*A)_{.1}(a_{.n}^*) \\ \text{cdet}_2(A^*A)_{.2}(a_{.1}^*) & \text{cdet}_2(A^*A)_{.2}(a_{.2}^*) & \dots & \text{cdet}_2(A^*A)_{.2}(a_{.n}^*) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \text{cdet}_n(A^*A)_{.n}(a_{.1}^*) & \text{cdet}_n(A^*A)_{.n}(a_{.2}^*) & \dots & \text{cdet}_n(A^*A)_{.n}(a_{.n}^*) \end{pmatrix}$$

Враховуючи, що для $\forall j = \overline{1, n}$ $\text{ddet } A = \text{det}(A^*A) = \text{cdet}_j(A^*A) =$
 $= \sum_i \text{cdet}_j(A^*A)_{.j}(a_{.i}^*) \cdot a_{ij} = \sum_i \mathbb{Q}_{ij} \cdot a_{ij}$, звідси одержимо формулу (4).

Аналогічно можна довести формулу (5).

Теорему доведено.

Розглянемо праву систему лінійних рівнянь над тілом S

$$A \cdot x = y \quad (6)$$

із матрицею коефіцієнтів $A \in M(n, S)$, стовпцем вільних елементів $y = (y_1, \dots, y_n)^T$, де $\forall i = \overline{1, n}$ $y_i \in S$, і стовпцем невідомих $x = (x_1, \dots, x_n)^T$.

Теорема 8. Нехай $\text{ddet } A \neq 0$ і $f = A^*y$. Тоді система (6) має і при цьому єдиний розв'язок, який покомпонентно зображається як

$$x_j = \frac{\text{cdet}_j(A^*A)_{.j}(f)}{\text{ddet } A}, \quad (\forall j = \overline{1, n}). \quad (7)$$

Доведення. Оскільки, матриця $(LA)^{-1}$ задається однозначно, то стовпець x , що задається співвідношенням

$$x = (LA)^{-1} \cdot y = (A^*A)^{-1} A^* \cdot y, \quad (8)$$

є єдиним розв'язком системи лінійних рівнянь (7) над тілом S .

Нехай $f = A^* \cdot y$, де $f = (f_1, f_2, \dots, f_n)^T$ - n -мірний стовпець над тілом S . Запишемо розв'язок системи лінійних рівнянь (6) покомпонентно, розглядаючи матрицю $(A^*A)^{-1}$ як ліву обернену. Тоді з рівності (8)

одержимо $x_j = (\text{ddet } A)^{-1} \sum_{i=1}^n L_{ij} \cdot f_i$, $(\forall j = \overline{1, n})$, де L_{ij} - ліве алгебричне

доповнення матриці A^*A . Сума записана справа, в силу формули (3), відповідає стовпцевому визначнику по j -му стовпцю матриці, яку

одержимо з матриці A^*A , замінивши її j -й стовпець стовпцем f , тоді $x_j = (\text{ddet } A)^{-1} \text{cdet}_j(A^*A)_{.j}(f)$, $(\forall j = \overline{1, n})$, де $\hat{f} = A^*y$.

Теорему доведено.

Ще більш близьку аналогію до правила Крамера можна одержати в наступному частковому випадку, використовуючи визначникове зображення матриці оберненої до ермітової з теореми 5.

Теорема 9. Якщо основна матриця A правої системи лінійних рівнянь (6) над тілом S - ермітова і $\det A \neq 0$, то система має і при цьому єдиний розв'язок, який задається формулою $x_j = \frac{c\det_j A_{\cdot j}(y)}{\det A}$, $(\forall j = \overline{1, n})$.

Розглянемо ліву систему лінійних рівнянь над тілом S

$$x \cdot A = y \quad (9)$$

із матрицею коефіцієнтів $A \in M(n, S)$, рядком вільних елементів $y = (y_1, \dots, y_n)$, де $\forall i = \overline{1, n} \quad y_i \in S$, і стовпцем невідомих $x = (x_1, \dots, x_n)$. Аналогічно до теорем 8 та 9 можна довести наступні теореми.

Теорема 10. Нехай $ddet A \neq 0$ і $z = y \cdot A^*$. Тоді система (9) має і при цьому єдиний розв'язок, який покомпонентно зображається як

$$x_i = \frac{rdet_i(AA^*)(z)}{ddet A}, \quad (\forall i = \overline{1, n}). \quad (10)$$

Теорема 11. Якщо основна матриця A лівої системи лінійних рівнянь (9) над тілом S - ермітова і $\det A \neq 0$, то система має і при цьому єдиний розв'язок, який задається формулою $x_i = \frac{rdet_i A_{\cdot i}(y)}{\det A}$, $(\forall i = \overline{1, n})$.

Формули (7) і (10) є очевидним та природнім узагальненням правила Крамера для правої та лівої системи лінійних рівнянь над тілом S , що є кватерніоновою алгеброю над полем F нульової характеристики.

Література

1. И. М. Гельфанд, В. С. Ретах. Детерминанты матриц над некоммутативными кольцами. //Функциональный анализ и его приложения. - 1991. - 25, Вып. 2. - с. 13-35.
2. И. М. Гельфанд, В. С. Ретах. Теория некоммутативных детерминантов и характеристические функции графов. //Функциональный анализ и его приложения. - 1992. - 26, Вып. 4. - с. 33-45.
3. L.Chen. Definition of determinant and Cramer solutions over quaternion field. // Acta Math. Sinica (N. S.). - 1991 - 7 - p. 171-180.
4. L. Chen. Inverse matrix and properties of double determinant over quaternion field. // Science of China. Ser.A. - 1991. - 34 - p. 528-540.
5. І. І. Кирчей. Класична приєднана матриця для ермітової над тілом. // Мат. методи та фіз.-мех. поля. - 2001 - 44, №3. - с. 33-48.
6. І. І. Кирчей. Аналог класичної приєднаної матриці над тілом з інволюцією. // Мат. методи та фіз.-мех. поля. - 2003. - 46, №4. - с.81-91.

Надійшла до редакції 15.10.2005

УДК 519.21

Анатолій О. Пашко¹

Чисельне моделювання субгауссових випадкових полів

Розглянуто алгоритм побудови моделі випадкових полів, що зображуються у вигляді стохастичних інтегралів. Наведені основні означення, здобуте оцінки точності моделювання в метриках різних функціональних просторів. Всі результати мають місце для гауссових випадкових полів.

Ключові слова: субгауссовий процес, моделювання, чисельний метод.

Anatoliy A. Pashko¹

Computational modeling of sub-Gaussian random fields

The algorithm of random fields model construction is considered. Random fields are represented as stochastic integrals. The basic definitions are given, estimations of modeling accuracy were done in metrics of different functional spaces. All results are valid for Gaussian random fields.

Key Words: sub-Gaussian fields, simulation, numerical computing.

¹ E-mail: paa@univ.kiev.ua

У роботі розглядається алгоритм побудови моделі випадкових полів, що зображуються у вигляді стохастичних інтегралів. З бурхливим розвитком обчислювальної техніки методи статистичного моделювання, зокрема, чисельного моделювання випадкових процесів і полів, широко використовується в різних областях природних і соціальних наук, таких як, метеорологія, соціологія, фінансова математика, випробування технічних систем [1-2]. Методи Монте-Карло часто використовують для рішення задач, де класичні чисельні методи не можна застосувати, або при рішенні задач великої розмірності [1-2]. У [2] приведений огляд літератури.

Існує безліч методів моделювання випадкових процесів і полів [1, 3]. У більшості з них не оцінюються точність і надійність моделювання. У даній роботі розглядається метод, що дозволяє будувати моделі, що наближають випадкові поля з заданою точністю і надійністю в деяких функціональних просторах [3-5].

При моделюванні випадкових процесів і полів, як правило, намагаються відтворити гауссові або близькі до них випадкові процеси і поля. Необхідно відмітити, що ніколи не вдається одержати модель, що є дійсно гауссовим процесом. У більшості випадків за модель гауссового процесу вважають суму $\sum_{i=1}^M f_i(t)\xi_i$, де $\{\xi_i\}$ – незалежні гауссові випадкові величини.

Але при реальному моделюванні $\{\xi_i\}$, наприклад, коли

$\xi_i = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n \zeta_{ki}$, де $\{\zeta_{ki}\}$ – незалежні рівномірно розподілені на $[-1,1]$ випад-

кові величини, і в інших випадках, одержуємо не гауссові, а строго субгауссові випадкові величини. Тобто, у дійсності ми одержуємо моделі не гауссових, а строго субгауссових випадкових процесів або полів.

Тому в роботі будуються моделі строго субгауссових випадкових полів.

Основні означення.

Нехай $(\Omega, \mathcal{A}, P)$ – стандартний ймовірносний простір.

Означення 1. Випадкова величина ξ називається субгауссовою, якщо $E\xi = 0$ та існує таке $a \geq 0$, що для усіх $\lambda \in R^1$ має місце оцінка

$$E \exp\{\lambda \xi\} \leq \exp\left\{\frac{\lambda^2 a^2}{2}\right\}.$$

Простір субгауссових випадкових величин $Sub(\Omega)$ є банаховим [3] з нормою

$$\tau(\xi) = \sup_{\lambda \neq 0} \left[\frac{2 \ln E \exp\{\lambda \xi\}}{\lambda^2} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Означення 2. Випадкова величина ξ називається строго субгауссовою, якщо $E\xi = 0$ і для усіх $\lambda \in R^1$ має місце оцінка

$$E \exp\{\lambda \xi\} \leq \exp\left\{\frac{\lambda^2 \sigma^2}{2}\right\}, \quad \text{де } E\xi^2 = \sigma^2.$$

Означення 3. Родина випадкових величин $S_\Lambda \subset Sub(\Omega)$ називається строго субгауссовою, якщо для кожної скінченої або зліченої множини випадкових величин з S_Λ $\{\xi_i, i \in I\}$ і для усіх $\lambda_i \in R$ виконується

$$\tau^2\left(\sum_{i \in I} \lambda_i \xi_i\right) = E\left(\sum_{i \in I} \lambda_i \xi_i\right)^2.$$

Нехай (T, ρ) – компактний метричний простір, $T \in R^d$, а $\rho(\vec{t}, \vec{s})$ – евклідова метрика. Нехай $X = \{X(\vec{t}), \vec{t} \in T\}$ строго субгауссове сепарабельне випадкове поле, що зображується у вигляді

$$X(\vec{t}) = \sum_{l=1}^N \int_{R^d} f_l(\vec{t}, \vec{\lambda}) dZ_l(\vec{\lambda}),$$

де $T \in R^d$ має вигляд $T = \{\vec{t}, \rho(\vec{t}, 0) \leq L\}$, $L > 0$ – деяке число.

Нехай A – однозв'язна з кусочно-гладкою границею область у R^d , а D_n – деяке розбиття області A на n однозв'язних областей $A_1, A_2, \dots, A_n$ з кусочно-гладкими границями.

Означення 4. Апроксимаційною моделлю (A_p – модель) поля X будемо називати випадкове поле $X_n(\vec{t}, A)$, що задається формулою

$$X_n(\vec{t}, A) = \sum_{l=1}^N \sum_{i=1}^n f_l(\vec{t}, \vec{\lambda}_l) Z_l(A_l).$$

Позначимо

$$X_A(\vec{t}) = \sum_{l=1}^N \int_A f_l(\vec{t}, \vec{\lambda}) dZ_l(\vec{\lambda}), \quad X_{R^d \setminus A}(\vec{t}) = \sum_{l=1}^N \int_{R^d \setminus A} f_l(\vec{t}, \vec{\lambda}) dZ_l(\vec{\lambda}),$$

$$W_1(\varepsilon) = P \left\{ \sup_{\vec{t} \in T} |X_n(\vec{t}, A) - X_A(\vec{t})| > \varepsilon \right\}, \quad W_2(\varepsilon) = P \left\{ \sup_{\vec{t} \in T} |X_{R^d \setminus A}(\vec{t})| > \varepsilon \right\}.$$

Оцінка точності моделювання.

Нехай (R^d, Σ, ν) – вимірний простір, Σ – борелівська σ -алгебра, $\nu(\cdot)$ – скінченна міра.

Теорема 1. Випадкове поле $X_n(\vec{t}, A)$ є апроксимаційною моделлю поля X з надійністю $1 - \alpha$, $0 < \alpha < 1$ і точністю $\delta > 0$ в рівномірній метриці, якщо область A та її розбиття D_n обрані так, що виконується нерівність

$$\inf_{0 \leq x \leq 1} (W_1(\delta x) + W_2(\delta(1-x))) \leq \alpha.$$

Теорема 2. Випадкове поле $X_n(\vec{t}, A)$ є апроксимаційною моделлю поля X з надійністю $1 - \alpha$, $0 < \alpha < 1$, і точністю $\delta > 0$ в $L_p(T)$, $p > 1$, якщо область A і її розбиття D_n обрані так, що виконується нерівність

$$Q(D_n, A)(m(T))^{\frac{2}{p}} < \delta^2, \text{ при } 1 \leq p \leq 2,$$

$$Q(D_n, A)(m(T))^{\frac{2}{p}}(p+1) < \delta^2, \text{ при } p > 2,$$

$$\exp \left\{ \frac{1}{2} \right\} \frac{\delta}{(Q(D_n, A))^{\frac{1}{2}} (m(T))^{\frac{1}{p}}} \exp \left\{ - \frac{\delta^2}{2Q(D_n, A)(m(T))^{\frac{2}{p}}} \right\} < \alpha,$$

де $Q(D_n, A) = \sup_{\vec{t} \in T} \{ E(X(\vec{t}) - X_n(\vec{t}, A))^2 \}$, $m(T)$ – міра Лебега множини T в R^d .

Доведення теорем приведено в роботах [4-5].

У випадку, коли X однорідне в широкому розумінні випадкове поле, воно допускає зображення

$$X(\vec{t}) = \int_{R^d} \cos(\vec{t}, \vec{\lambda}) dZ_1(\vec{\lambda}) + \int_{R^d} \sin(\vec{t}, \vec{\lambda}) dZ_2(\vec{\lambda}),$$

де $Z_1(\vec{\lambda})$ і $Z_2(\vec{\lambda})$ – некорельовані випадкові міри, підлеглі мері $\nu(\cdot)$. Тоді

апроксимаційна модель має вигляд

$$X_n(\vec{t}, A) = \sum_{i=1}^n \left(\cos(\vec{t}, \vec{\lambda}_i) Z_1(A_i) + \sin(\vec{t}, \vec{\lambda}_i) Z_2(A_i) \right).$$

Виберемо область A та її розбиття наступним чином.

Нехай $A = \{ \vec{\lambda} : \rho(\vec{\lambda}, 0) \leq \Lambda \}$, $\Lambda > 0$.

Для деякого $m > 0$ позначимо $k_{r_i} = \frac{\Lambda}{m} r_i$, $i = 1, 2, \dots, d$, де r_i — деякі

цілі числа, $-m \leq r_i \leq m-1$, $\vec{\lambda}(r_1, \dots, r_d) = (k_{r_1}, \dots, k_{r_d})^T$.

Розбиття D_n визначимо елементами

$$A_{(r_1, \dots, r_d)} = \{ \vec{\lambda} : k_{r_s} \leq \lambda_s < k_{r_s+1}, s = 1, 2, \dots, d \}.$$

При цьому $n = (2m)^d$, а A_p — модель поля $X(\vec{t})$ має вигляд

$$X_n(\vec{t}, A) = \sum_{\substack{-m \leq r_i \leq m-1 \\ i=1, \dots, d}} \cos(\vec{t}, \vec{\lambda}(r_1, \dots, r_d)) Z_1(A_{(r_1, \dots, r_d)}) + \sin(\vec{t}, \vec{\lambda}(r_1, \dots, r_d)) Z_2(A_{(r_1, \dots, r_d)}).$$

Тоді при моделюванні випадкові величини $\{Z_1(A_{(r_1, \dots, r_d)}), Z_2(A_{(r_1, \dots, r_d)})\}$ можна розглядати як родину некорельованих строго субгауссових випадкових величин таких, що

$$E Z_1^2(A_{(r_1, \dots, r_d)}) = E Z_2^2(A_{(r_1, \dots, r_d)}) = \nu(A_{(r_1, \dots, r_d)}).$$

Для однорідних випадкових полів у $L_p(T)$, $p > 1$, для

$E(X(\vec{t}) - X_n(\vec{t}, A))^2$ одержано оцінки [4-5]

$$E(X(\vec{t}) - X_n(\vec{t}, A))^2 \leq \frac{\Lambda^2 d}{m^2} \nu(A) \sum_{i=1}^d t_i^2 + \nu(R^d \setminus A),$$

відповідно $Q(D_n, A) = \sup_{\vec{t} \in T} \{E(X(\vec{t}) - X_n(\vec{t}, A))^2\} \leq \frac{\Lambda^2 d^2 L^2}{m^2} \nu(A) + \nu(R^d \setminus A)$.

Аналогічно, для рівномірної метрики мають місце леми.

Лема 1. Якщо X однорідне в широкому розумінні випадкове поле, то для розглянутого розбиття D_n мають місце оцінки

$$W_1(\varepsilon) = P \left\{ \sup_{\vec{t} \in T} |X_n(\vec{t}, A) - X_A(\vec{t})| > \varepsilon \right\} \leq 2 \exp \left\{ - \frac{\varepsilon^2}{16(Lc)^2} \right\} \frac{\varepsilon^2 6^{2d}}{16(cL)^4},$$

де $c = \frac{\Lambda d}{2m} \left(1 + (\Lambda d)^2 L^2 \right)^{\frac{1}{2}} (\nu(A))^{\frac{1}{2}}$.

Лема 2. Якщо X однорідне в широкому розумінні випадкове поле і виконується умова

$$\int_{R^d} \left(\sum_{i=1}^d |\lambda_i| \right)^\beta d\nu(\vec{\lambda}) < \infty, \quad 0 < \beta \leq 2,$$

то для розглянутого розбиття D_n мають місце оцінки

$$W_2(\varepsilon) = P\left\{\sup_{\vec{t} \in T} |X_{R^d \setminus A}(\vec{t})| > \varepsilon\right\} \leq 2 \exp\left\{-\frac{\varepsilon^2}{2\gamma_0^2\left(1+2\frac{\beta^2}{\varepsilon^2}\right)}\right\} \exp\left\{\frac{1}{2}\right\}^*$$

$$\left(2Lc^{\frac{2}{\beta}}\right)^{2d} \frac{\varepsilon^{\frac{24d}{\beta}}}{\gamma_0^{\frac{32d}{\beta}} \beta^{\frac{4d}{\beta}}} [\gamma_0 + 4\beta]^{\frac{8d}{\beta}},$$

де $\gamma_0^2 = \nu(R^d \setminus A)$, $c = 2^{1-\frac{\beta}{2}} \left(\int_{R^d \setminus A} \left(\sum_{i=1}^d |\lambda_i| \right)^\beta d\nu(\vec{\lambda}) \right)^{\frac{1}{2}}$.

Алгоритм моделювання випадкових полів.

Апроксимаційну модель поля X можна одержати в такий спосіб: необхідно змодельовати суму [3]

$$X_n(\vec{t}, A) = \sum_{\substack{-m \leq r_i \leq m-1 \\ i=1, \dots, d}} \cos(\vec{t}, \vec{\lambda}(r_1, \dots, r_d)) Z_1(A_{(r_1, \dots, r_d)}) + \sin(\vec{t}, \vec{\lambda}(r_1, \dots, r_d)) Z_2(A_{(r_1, \dots, r_d)}),$$

де $\{Z_1(A_{(r_1, \dots, r_d)}), Z_2(A_{(r_1, \dots, r_d)})\}$ – родина строго субгауссових випадкових величин з відомою кореляційною матрицею $C = \| \nu(A_{(r_1, \dots, r_d)}) \|$.

По заданим точності δ і надійності $\alpha > 0$, $\alpha \in (0, 1)$, з оцінок $P\{\|X(\vec{t}) - X_n(\vec{t}, A)\| > \delta\} \leq V_n(\delta)$ визначаємо число n та розбиття області A , так щоб виконувалося $V_n(\delta) \leq \alpha$.

Розглянутий алгоритм моделювання легко реалізується на ЕОМ. Становить інтерес одержання оцінок для конкретних випадкових полів, а також для полів, що зображуються у вигляді кратних випадкових рядів.

Література

1. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. – М.: Наука, 1982.
2. Сабельфельд К.К. Методы Монте-Карло в краевых задачах. – Новосибирск: Наука, 1989.
3. Козаченко Ю.В., Пашко А.О. Моделювання випадкових процесів. – К.: „Київський університет”, 1999.
4. Козаченко Ю.В., Пашко А.О. Про моделювання випадкових полів. I // Теорія ймовір. та матем. статистика – 1999. – Вип. 61. – С.59-71.
5. Козаченко Ю.В., Пашко А.О. Про моделювання випадкових полів. II // Теорія ймовір. та матем. статистика – 2000. – Вип. 62. – С.51-63.

Надійшла до редакції 05.10.2005

УДК : 519.21

Дмитро І. Похилько

Експоненційні нерівності для швидкості збіжності в рівномірній нормі вейвлет-оцінки щільності компоненти суміші

В роботі розглянуто поведінку лінійної вейвлет-оцінки в рівномірній нормі. Оцінено математичне сподівання експоненти супремуму відхилення оцінки від істинного значення щільності та ймовірність великих відхилень, для чого використано апарат субгаусових процесів.

Ключові слова: суміш, вейвлети, оцінка щільності, субгаусові процеси.

Dmytro I. Pokhylko

Exponential inequalities for convergence rates in uniform norm of wavelet-based estimators of mixture component's density

We considered the convergence rate in uniform norm of linear wavelet-based estimator. The mean of exponent of estimator deviation was estimated, as well as probability of large deviations. We used the instrument of subgaussian processes.

Key words: mixture, wavelet, density estimation, subgaussian processes

E-mail: pdi_2004@mail.ru

Вступ

Суміші різних імовірнісних розподілів часто використовуються у статистиці як математичні моделі розподілу реальних даних. Класична модель суміші має вигляд $P\{\xi \in A\} = \sum_{m=1}^M w_m H_m(A)$, де M – кількість компонент суміші, H_m – деякі імовірнісні розподіли, w_m – концентрація m -тої компоненти у суміші. Як правило, їх використовують, коли об'єкти, що спостерігаються, можуть належати одному з M різних класів (популяцій, компонент), розподіли характеристик, що спостерігаються, (ξ) дорівнюють H_m для m -тої компоненти, а ймовірність спостерігати об'єкт з m -тої компоненти дорівнює w_m . Якщо невідомо, до якої популяції належать спостережувані об'єкти, ми отримуємо класичну модель суміші (див. [1]).

Ми розглянемо задачу побудови проекційних оцінок щільності компоненти суміші з використанням базисів вейвлетів у випадку, коли спостереження є вибіркою з суміші із змінними концентраціями. Тобто вважаємо, що вибірка $\{\xi_j\}_{j=1}^N$ складається з незалежних випадкових величин з розподілами, що мають щільності, при чому щільність розподілу ξ_j має вигляд:

$$p^j(x) = \sum_{m=1}^M w_m^j p_m(x) \quad (1)$$

де M – кількість компонент суміші, p_m – щільність m -ї компоненти, w_m^j – ймовірність спостерігати об'єкт з m -ї компоненти в j -му спостереженні. Зауважимо, що всі побудови проводяться при певному обсязі вибірки N , тому індекс N опускається всюди, де це можливо. Якщо індекс N використовуватиметься, то він буде записаний після двокрапки (напр. $w_{j,N}^m$).

Ми розглядатимемо поведінку лінійної оцінки в рівномірній нормі у випадку, коли щільності компонент належать просторам Бесова. На відміну від випадку різноманітних інтегральних норм, поведінка оцінки в рівномірній нормі досліджена досить слабо. Метою цієї статті є отримання оцінки для математичного сподівання експоненти супремуму відхилення оцінки від істинного значення щільності та оцінки ймовірності великих відхилень. Для цього будемо використовувати апарат субгаусових процесів, викладений в [2].

Лінійні і нелінійні вейвлет-оцінки щільності однорідних спостережень розглянуто в [3-5]. Вейвлет-оцінки щільності є частковим випадком проєктивних оцінок, різні їх властивості у випадку однорідних спостережень розглянуто в [6]. Теорія вейвлет-аналізу викладена в [4,7,8]. Різні задачі аналізу сумішей досліджено в [1], в [9] розглядаються ядерні оцінки щільності компонент сумішей.

1. Додаткові відомості

Факти з теорії субгаусових величин і процесів викладаються за [2]. Тут і надалі в.в. – випадкова величина (величини), м.н. – майже напевно.

Означення 1. Випадкова величина ξ називається субгаусовою, якщо $\exists a \in [0, +\infty): \forall \lambda \in R \quad E \exp\{\lambda \xi\} \leq \exp\{a^2 \lambda^2 / 2\}$. Клас всіх субгаусових в.в., заданих на спільному імовірнісному просторі $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$, позначатимемо $Sub(\Omega)$. Субгаусовим стандартом в.в. ξ називається величина

$$\tau(\xi) = \inf \left\{ a \geq 0 : E \exp\{\lambda \xi\} \leq \exp\left\{\frac{a^2 \lambda^2}{2}\right\}, \lambda \in R \right\}. \quad (2)$$

В [2] доводиться, що простір $Sub(\Omega)$ є банаховим відносно норми $\tau(\cdot)$, при чому, якщо $E\xi = 0$ та існує не випадкова константа $c: |\xi| \leq c$ м.н., то $\tau(\xi) \leq c$. Крім того для субгаусової норми існують наступні нерівності (див. [2, Т.1.3], [2, Л.1.7]):

$$\tau(\xi) \leq \frac{\sqrt[4]{3.1e^{9/10}}}{\sqrt{2}} \sup_{k \geq 1} \frac{(E\xi^{2k})^{1/2k}}{\sqrt{k}}, \quad (3i)$$

$$\tau^2\left(\sum_{k=1}^n \xi_k\right) \leq \sum_{k=1}^n \tau^2(\xi_k), \quad (3ii)$$

де нерівність (3ii) виконується для суми незалежних субгаусових в.в.

Означення 2. Випадковий процес $X(t)$, заданий на параметричній множині T називається субгаусовим процесом, якщо $\forall t \in T \quad X(t)$ є субгаусовою в.в.

Означення 3. Нехай $T \neq \emptyset$. Функція $\rho: T \times T \rightarrow [0, +\infty)$ називається псевдометрикою, якщо:

- 1) $\rho(t, s) = \rho(s, t), \forall s, t \in T$;
- 2) $\rho(t, s) \leq \rho(t, v) + \rho(v, s), \forall s, t, v \in T$;

3) якщо $t=s$, то $\rho(t,s)=0$.

Нам будуть потрібні такі характеристики як метрична масивність і метрична ентропія множини.

Означення 4. Нехай (S,ρ) – псевдометричний простір і $\varepsilon > 0$. Якщо існує скінчена ε -сітка для множини S , то $N_\rho(S,\varepsilon)$ означає число елементів в найменшій ε -сітці. $N_\rho(S,\varepsilon) = +\infty$, якщо скінченої ε -сітки не існує. Функцію $N_\rho(S,\varepsilon)$ будемо називати метричною масивністю множини S відносно псевдометрики ρ . Покладемо

$$H_\rho(S,\varepsilon) = \begin{cases} \ln N_\rho(S,\varepsilon), & N_\rho(S,\varepsilon) < +\infty \\ +\infty, & N_\rho(S,\varepsilon) = +\infty \end{cases} \quad (4)$$

Функцію $H_\rho(S,\varepsilon)$ будемо називати метричною ентропією множини S відносно псевдометрики ρ .

Мають місце наступні твердження:

Твердження 1. (Частковий випадок [2,Т.3.4.1]). Нехай $X = (X(t), t \in T)$ – деякий субгаусів процес. Псевдометрика, породжена цим процесом має вигляд $\rho_X(t,s) = \tau(X(t) - X(s))$. Якщо виконані наступні умови:

- 1) $\varepsilon_0 := \sup_{t \in T} \tau(X(t)) < \infty$;
 - 2) простір (T, ρ_X) – сепарабельний і процес X є сепарабельним на (T, ρ_X) ;
 - 3) $I(\varepsilon_0) := \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\varepsilon_0} \sqrt{H(\varepsilon)} d\varepsilon < \infty$, де $H(\varepsilon) = H_{\rho_X}(T, \varepsilon)$,
- то $\forall \lambda > 0$:

$$E \exp \left\{ \lambda \sup_{t \in T} |X(t)| \right\} \leq 2 \exp \left\{ 2\lambda^2 \varepsilon_0^2 + 8\lambda I(\varepsilon_0) \right\}. \quad (5)$$

Твердження 2. (Частковий випадок [2, Т.3.4.4]). Нехай $(X(t), t \in T)$ – деякий субгаусів процес для якого виконуються умови 1)-2) попереднього твердження і крім того $\exists \alpha > 0$: $\int_0^{\varepsilon_0} N^\alpha(\varepsilon) d\varepsilon < \infty$, де $N(\varepsilon) = N_{\rho_X}(T, \varepsilon)$. Тоді $\forall \theta \in (0,1), \forall u > 0$:

$$P \left\{ \sup_{t \in T} |X(t)| \geq u \right\} \leq 2 \exp \left\{ -\frac{u^2 (1-\theta)^2}{2\varepsilon_0^2} \right\} \left(\frac{1}{\theta \varepsilon_0} \int_0^{\varepsilon_0} N^\alpha(\varepsilon) d\varepsilon \right)^{1/\alpha}. \quad (6)$$

2. Результати

Нехай $W = (w_j^m)_{j=1, m=1}^{N, M}$ – матриця з M стовпчиками та N рядками і $e^m = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$ – m -й базисний вектор в R^M . Позначимо

$$a^m = W \Gamma^{-1} e^m, \quad (7)$$

де $\Gamma = \frac{1}{N} W^T W$. Всі побудови проводяться в припущенні, що $\det \Gamma > 0$, докладніше про цю умову див. в [1].

Позначимо $\forall x, y \in R^N$ $\langle x, y \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i y_i$, $\|x\|_N = \sqrt{\langle x, x \rangle_N}$.

Точне означення вейвлетів та просторів Бесова B_{spq} можна знайти в [3-5], для нас буде важливою можливістю наступного розкладу. Нехай φ, ψ – f - та m - вейвлети, тоді $\forall j_0 \in Z$ $p_m(x)$ з $L_2(R)$ можна зобразити у вигляді збіжного в $L_2(R)$ ряду:

$$p_m = \sum_k \alpha_{j_0 k}^m \varphi_{j_0 k} + \sum_{j > j_0} \sum_k \beta_{j k}^m \psi_{j k}, \quad (8)$$

де $\alpha_{j_0 k}^m = \int p_m(x) \varphi_{j_0 k}(x) dx$, $\beta_{j k}^m = \int p_m(x) \psi_{j k}(x) dx$, $\varphi_{j k} = 2^{j/2} \varphi(2^j x - k)$, $\psi_{j k} = 2^{j/2} \psi(2^j x - k)$. Ідея побудови оцінки наступна: знехтуємо "хвостом" ряду (8) і будемо оцінювати функцію

$$\bar{p}_m^j := \sum_k \alpha_{j_0 k}^m \varphi_{j_0 k} + \sum_{j=j_0}^{j-1} \sum_k \beta_{j k}^m \psi_{j k} \quad (9)$$

Так як φ, ψ – f - та m - вейвлети, то функції $\bar{p}_m^j$ за певних умов швидко наближають p_m при $j \rightarrow \infty$ (див. [4]), і виконується рівність $\bar{p}_m^j = \sum_k \alpha_{j k}^m \varphi_{j k}$.

Позначимо $B_{spq}(M', T') := \{f \in B_{spq}, \|f\|_{spq} \leq M', \text{diam supp} \leq T'\}$, де B_{spq} – простір Бесова з нормою $\|\cdot\|_{spq}$ і $\text{diam } A := \sup_{x, y \in A} |x - y|, \forall A \subset R$.

Розглянемо лінійну оцінку щільності компоненти суміші

$$\hat{p}_m^j(x) := N^{-1} \sum_{i=1}^N a_i^m K_j(x, X_i), \quad (10)$$

де a_i^m – i -та координата вектора a^m визначеного в (7), і $K_j(x, y) := \sum_k \varphi_{j k}(x) \varphi_{j k}(y)$ – ядро, асоційоване з вейвлетом φ (див. [4]). Позначимо $\theta_\varphi(x) = \sum_k |\varphi_{0 k}(x)|$, ми будемо використовувати гладенькі вейвлети з компактними носіями, тому $\forall x$ $\theta_\varphi(x) < \infty$.

Нас буде цікавити математичне сподівання експоненти відстані між оцінкою та істиною щільністю в рівномірній нормі $\|\cdot\|_\infty$, тобто $E \exp \|\hat{p}_m^j - p_m\|_\infty$. В [10] доведено, що $E \hat{p}_m^j = \bar{p}_m^j$.

Покладемо

$$Y_i(x) = K_j(x, X_i) - EK_j(x, X_i), Z_m(x) = N^{-1} \sum_{i=1}^N a_i^m Y_i(x), \quad (11)$$

тоді $Z_m = \hat{p}_m^j - \bar{p}_m^j$. Позначимо $a = \inf \text{supp} \sum_{m=1}^M p_m - \text{diam supp } \varphi$, і $b = \sup \text{supp} \sum_{m=1}^M p_m + \text{diam supp } \varphi$. Ми будемо розглядати вейвлети і щільності з компактними носіями, тому скрізь в роботі $-\infty < a < b < +\infty$ і $L := \text{diam } T < \infty$. Z_m ми будемо розглядати як випадковий процес з параметричною множиною $T = [a, b]$, ззовні множини T $Z_m \equiv 0$.

Теорема 1. Якщо φ – f -вейвлет такий, що $\|\theta_\varphi\|_\infty < \infty$, то Z_m є субгаусовим процесом і $\forall x$:

$$\tau(Z_m(x)) \leq C_\varphi \|a^m\|_N 2^j N^{-1/2}, \quad (12)$$

де $C_\varphi := 2\|\varphi\|_\infty\|\theta_\varphi\|_\infty$.

Доведення. Покажемо, що $\forall x \ Y_i(x)$ є субгаусовою в.в., при чому

$$\tau(Y_i(x)) \leq 2 \cdot 2^j \|\varphi\|_\infty \|\theta_\varphi\|_\infty. \quad (13)$$

Оцінимо $\sup_{x \in T} |Y_i(x)|$. Так як $\forall x \ EY_i(x) = 0$, і $\forall x$:

$$|Y_i(x)| \leq 2 \sup_{x,y \in R} |K_j(x,y)| \leq 2^{j+1} \|\varphi\|_\infty \|\theta_\varphi\|_\infty < \infty,$$

то $Y_i(x)$ – субгаусові, при чому виконується (13). Оскільки $\forall x \ Y_i(x)$ є незалежними в.в., то (див. (3.ii)) для $Z_m(x) = N^{-1} \sum_{i=1}^N a_i^m Y_i(x)$ виконується (12). Отже, Z_m є субгаусовим процесом. □

Лема 1. Якщо $\varphi \in C^r, r \geq 1$ – $\mathfrak{f}$ -вейвлет з компактним носієм, то для псевдометрики ρ_{Z_m} виконується наступна нерівність:

$$\sup_{x,y \in T} \rho_{Z_m}(x,y) \leq N^{-1/2} 4^j |x-y| \|a^m\|_N C_\varphi^1, \quad (14)$$

де $C_\varphi^1 := 4.3\|\varphi\|_\infty\|\theta_\varphi\|_\infty$.

Доведення.

$$\rho_{Z_m}(x,y) = \tau(Z_m(x) - Z_m(y)) \leq N^{-1} \|a^m\|_N \tau(Y_i(x) - Y_i(y)).$$

Величину $\tau(Y_i(x) - Y_i(y))$ оцінимо за допомогою нерівності (3). Для цього потрібно оцінити $E|Y_i(x) - Y_i(y)|^{2s}, s \in N$:

$$\begin{aligned} E|Y_i(x) - Y_i(y)|^{2s} &= \sum_{m=1}^M w_i^m \int_{\mathbb{R}} \left(\sum_k (\varphi_{jk}(x) - \varphi_{jk}(y)) \varphi_{jk}(z) \right)^{2s} p_m(z) dz \\ &\leq \sup_{x,y \in R} |\varphi_{jk}(x) - \varphi_{jk}(y)|^{2s} \sum_{m=1}^M w_i^m \int_{\mathbb{R}} \left(\sum_k |\varphi_{jk}(z)| \right)^{2s} p_m(z) dz \leq |x-y|^{2s} \|\varphi\|_\infty^{2s} \|\theta_\varphi\|_\infty^{2s} 2^{4js} \end{aligned}$$

Отже, з (3i) випливає, що $\tau(Y_i(x) - Y_i(y)) \leq 4.3 \cdot 4^j |x-y| \|\varphi\|_\infty \|\theta_\varphi\|_\infty$. Оскільки $\varphi' \in C(R)$, $\text{supp } \varphi$ – компакт то $\|\varphi\|_\infty < \infty$, а $\|\theta_\varphi\|_\infty \leq \|\varphi\|_\infty (\text{diam supp } \varphi + 2) < \infty$. Застосувавши до Z_m (3ii), отримаємо (14). □

Лема 2. При виконанні умов Лема 1 простір (T, ρ_{Z_m}) є сепарабельним і процес Z_m сепарабельний на ньому.

Доведення. Сепарабельність простору (T, ρ_{Z_m}) випливає з того факту, що згідно (14) довільна ε -сітка в (T, d_1) , де d_1 – евклідова відстань в R^1 , є $C\varepsilon$ -сіткою в (T, ρ_{Z_m}) , де $C = N^{-1/2} 4^j \|a^m\|_N C_\varphi^1$.

Те що процес Z_m сепарабельний на просторі (T, d_1) , неважко довести, використавши критерій сепарабельності випадкової функції (див. [11, Л.1, с.204]) та той факт, що для довільного значення в.в. $X_i \ K_j(x, X_i)$ – гладень-

ка функція, при чому $\left| \frac{\partial}{\partial x} K_j(x, X_i) \right| \leq 4' \|\varphi\|_\infty \|\theta_\varphi\|_\infty$. Сепарабельність процесу Z_m на просторі (T, ρ_{Z_m}) можна довести, використавши твердження [2, Л.3.1.2] та той факт, що Z_m сепарабельний на просторі (T, d_1) а норма d_1 мажоруює ρ_{Z_m} згідно Лема 1.

□

Теорема 2. Якщо $\varphi \in C^r, r \geq 1$ – f-вейвлет з компактним носієм, $j \geq 1$ і $2' L \frac{C_\varphi^1}{C_\varphi} > 1$, то виконується наступна нерівність:

$$E \exp \left\{ \lambda \sup_{x \in T} |Z_m(x)| \right\} \leq 2 \exp \left\{ \lambda^2 \frac{4' C_\varphi^2 \|a^m\|_N^2}{N} + \frac{8 \lambda C_\varphi 2' \|a^m\|_N}{\sqrt{N}} \left(j \ln \frac{2 L C_\varphi^1}{C_\varphi} + \pi \right) \right\}. \quad (15)$$

Доведення. Перевіримо виконання умов твердження 1:

ε_0 не перевищує величини $\varepsilon_0^* := 2' N^{-1/2} C_\varphi \|a^m\|_N$, підрахованої в Теоремі 1.

Умова 2. забезпечується Лемою 2.

Основна задача – оцінити величину $I(\varepsilon_0)$.

Спочатку оцінимо метричну ентропію $H(\varepsilon)$. З Лема 1 випливає, що в якості ε -сітки в просторі (T, ρ_{Z_m}) можна взяти $\sqrt{N} (4' \|a^m\|_N C_\varphi^1)^{-1} \varepsilon$ -сітку в просторі (T, d_1) , де d_1 – евклідова відстань в R^1 . Отже, для метричних масивності $N(\varepsilon)$ та ентропії $H(\varepsilon)$ простору (T, ρ_{Z_m}) виконуються нерівності:

$$N(\varepsilon) \leq \frac{4' L C_\varphi^1 \|a^m\|_N}{\sqrt{N} \varepsilon} + 1, \quad H(\varepsilon) \leq \ln \left(\frac{4' L C_\varphi^1 \|a^m\|_N}{\sqrt{N} \varepsilon} + 1 \right). \quad (16)$$

Перейдемо безпосередньо до оцінювання $I(\varepsilon_0)$. Врахувавши те, що $\forall \varepsilon \leq \varepsilon_0$ виконується $4' L C_\varphi^1 \|a^m\|_N (\varepsilon \sqrt{N})^{-1} \geq 2' L C_\varphi^1 (C_\varphi)^{-1} \geq 1$, отримаємо:

$$I(\varepsilon_0) \leq I^*(\varepsilon_0^*) := \int_0^{\varepsilon_0^*} \sqrt{\ln(A \varepsilon^{-1})} d\varepsilon, \quad (17)$$

де $A := 2 L 4' C_\varphi^1 \|a^m\|_N N^{-1/2}$. Відомо, що

$$\int_0^y \sqrt{\ln(A x^{-1})} dx = y \ln(A y^{-1}) + \frac{1}{2} \pi A \operatorname{Erfc}(\sqrt{\ln(A y^{-1})}), \quad (18)$$

де $\operatorname{Erfc}(z) = 2 \pi^{-1/2} \int_z^\infty e^{-t^2} dt \leq \sqrt{2} e^{-z^2} z^{-1}$, а отже,

$$I(\varepsilon_0) \leq \varepsilon_0^* \ln \left(\frac{2'^{j+1} L C_\varphi^1}{C_\varphi} \right) + \frac{\pi \varepsilon_0^*}{\sqrt{2} (j+1) \ln 2}. \quad (19)$$

Врахувавши нерівність $2\sqrt{2} \ln 2 \geq 1$, отримаємо:

$$I(\varepsilon_0) \leq 2' N^{-1/2} C_\varphi \|a^m\|_N \left(j \ln \frac{2 L C_\varphi^1}{C_\varphi} + \pi \right). \quad (20)$$

Підставляючи (20) в (5) отримаємо (15).

□

Безпосереднім наслідком є наступна теорема.

Теорема 3. Нехай виконуються умови Т.2, $p_m \in B_{spq}(M', T') \cap C(R)$ і $j: 2^j \leq N^{1/(2s+2)} < 2^{j+1}$ (позначатимемо $2^j \propto N^{1/(2s+2)}$). Тоді $\forall s, 0 < s < r+1$, $\forall p \geq 1, \forall q \geq 1$ існує $C = C(s, p, q, M', T', \varphi, a^m)$:

$$\sup_{p_m, m=1, M} E \exp \left\{ \frac{N^{s/(2s+2)}}{\ln N} \sup_{x \in T} |\hat{p}'_m(x) - p_m(x)| \right\} \leq C, \quad (21)$$

де супремум береться по всім щільностям $p_m \in B_{spq}(M', T') \cap C(R)$.

Доведення. Розкладемо похибку на два доданки: $|\hat{p}'_m(x) - p_m(x)| \leq |Z_m(x)| + |\bar{p}'_m(x) - p_m(x)|$. Використавши [4, Т.9.3] та умови теореми, можна показати існування такої константи C_1 , що $\sup_{x \in R} |\bar{p}'_m - p_m(x)| \leq C_1 2^{-js}$. Використавши Т.2, отримаємо:

$$\forall \lambda > 0 \quad E \exp \{ \lambda \sup_{x \in T} |\hat{p}'_m - p_m| \} \leq F(\lambda, j, N), \text{ де } F(\lambda, j, N) \text{ дорівнює}$$

$$2 \exp \left\{ 2 \left(2^j \lambda C_\varphi \|a^m\|_N N^{-1/2} \right)^2 + 8 \lambda 2^j N^{-1/2} C_\varphi \|a^m\|_N \left(j \ln \frac{2 L C_\varphi^1}{C_\varphi} + \pi \right) + C_1 \lambda 2^{-js} \right\}. \quad (22)$$

Оскільки $2^j \propto N^{-1/(2s+2)}$, то $2^j N^{-1/2} \propto N^{-s/(2s+2)}$ і $2^{-js} \propto N^{-s/(2s+2)}$, що і доводить теорему. □

Зауваження 1. При виконанні умов Теореми 3 отримаємо: $\forall l \geq 1$

$$E \sup_{x \in T} |\hat{p}'_m(x) - p_m|^l \leq C (\ln N)^l (l/e)^l N^{-ls/(2s+2)}. \quad (23)$$

Зауваження 2. Якщо $s > 1/p$, то $B_{spq}(M', T') \subset C(R)$ (див. [4]).

Використавши твердження 2, отримаємо оцінку для імовірності великих відхилень $\hat{p}'_m - \bar{p}'_m$. Оцінка є точнішою, ніж та, яку можна отримати, застосовувавши нерівність Чебишева до (15). Складова відхилення $\bar{p}'_m - p_m$ має нестохастичну природу і оцінюється іншими методами (див. [4]).

Теорема 4. Якщо виконуються умови Т.3, то $\forall u > 0$ виконується:

$$P \left\{ \sup_{x \in T} |\hat{p}'_m(x) - \bar{p}'_m(x)| \geq u \right\} \leq \frac{128 C_\varphi^1 \|a^m\|_N}{\sqrt{2e}} \frac{4^j}{u \sqrt{N}} \exp \left\{ - \frac{u^2 N 4^{-j}}{16 (C_\varphi \|a^m\|_N)^2} \right\} \quad (24)$$

Доведення. Умови теореми забезпечують виконання умов 1)-2) твердження 2. При виконанні умов теореми з (16) випливає $N(\varepsilon) \leq A \varepsilon^{-1}$, де $A := 2 C_\varphi^1 \|a^m\|_N 4^j N^{-1/2}$. Отже $\forall \alpha \in (0, 1)$

$$\int_0^{\varepsilon_0} N^\alpha(\varepsilon) d\varepsilon \leq A^\alpha (\theta \varepsilon_0)^{1-\alpha} (1-\alpha)^{-1} < \infty, \quad (25)$$

Підставивши в (6) з $\alpha = 1/2, \theta = 1/2$ отримаємо

$$P \{ \sup_{x \in T} |Z_m(x)| \geq u \} \leq 16 \exp \{ -u^2 \varepsilon_0^{-2} / 8 \} A \varepsilon_0^{-1}. \quad (26)$$

Врахувавши те, що $\forall a > 0 \forall x > 0: \exp \{ -ax^{-2} \} \leq (2ae)^{-1/2}$ отримаємо:

$$P\left\{\sup_{x \in \mathcal{T}} |Z_m(x)| \geq u\right\} \leq \frac{16A}{\sqrt{2eu^2/16}} \exp\left\{-\frac{u^2}{16\epsilon_0^2}\right\} \leq \frac{128C_\varphi^4 \|a^m\|_N^4}{u\sqrt{2eN}} \exp\left\{\frac{-u^2 N 4^{-j}}{16(C_\varphi \|a^m\|_N)^2}\right\}.$$

□

3. Висновки

Отже, ми розглянули поведінку лінійної оцінки в рівномірній нормі. Було отримано оцінку для математичного сподівання експоненти супремуму відхилення оцінки від істинного значення щільності та для ймовірності великих відхилень.

Література

1. Майборода Р.Є. Статистичний аналіз сумішей: навчальний посібник. – К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2003.
2. Булдыгин В.В., Козаченко Ю.В. Метрические характеристики случайных величин и процессов. – К.: ТВиМС, 1998.
3. D. Donoho, I. Johnstone, G. Kerkycharian and D. Picard. Density estimation by wavelet tresholding // Annals of Statistics, 1996, 24, p.508-539.
4. W. Härdle, G. Kerkycharian, D. Picard, A. Tsybakov. Wavelets, Approximation, and Statistical Applications. Springer New York Inc., New York, 1998.
5. Vidakovic B. Statistical Modeling by Wavelets. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1999.
6. Деврой Л., Дьёрфи Л. Непараметрическое оценивание плотности, L_1 -подход. – М.:Мир, 1988.
7. Козаченко Ю.В. Лекції з теорії вейвлетів. – К.: ТВиМС, 2004.
8. Daubechies I. Ten Lectures on Wavelets. SIAM, Philadelphia, 1996.
9. Sugakova O.V. Asymptotic of a kernel estimate for distribution density constructed from observations of a mixture with varying concentration. // Theor. Probab. Math. Statist. 1999, N 59. - p.161-171.
10. Похилько Д.І. Вейвлет-оцінки щільності по спостереженням з суміші. // Теорія ймовірностей та математична статистика, 2004, №70, с.121-130.
11. Гихман И.И., Скороход А.В. Теория случайных процессов. Т.1. – М.: Наука, – 1971.

Надійшла до редакції 10.11.2005

УДК 512.7+514.7

Тімур М. Шамілев*

Timur M. Shamilev*

Твірні диференціального поля інваріантних диференціальних раціональних функцій лінійчатих поверхонь для дії групи $O(n, R)$ в R^n .

Generators of the differential field of invariant differential rational functions of ruled surfaces for the action of the group $O(n, R)$ in R^n .

У цій роботі визначається диференціальне поле G -інваріантних диференціальних раціональних функцій від системи лінійчатих поверхонь для дії групи $G=O(n, R)$ і описується скінченна система твірних цього поля.

Definition of the differential field of G -invariant differential rational functions from a system of ruled surfaces for the action of the group $G=O(n, R)$ is introduced and a finite system of generators of this field is described.

Ключові слова: диференціальне поле, лінійчаті поверхні, раціональна функція.

Key words: differential field, ruled surface, rational function.

*E-mail: timurshmlv@mail.ru

Задача визначення базисних інваріантів різних груп є однією із стандартних як в загальній теорії інваріантів [1, 2], так і в її застосуваннях до диференціальної геометрії (дивись наприклад [3]–[7]). У роботах [4], [5] вивчалось диференціальне поле G -інваріантних диференціальних раціональних функцій від системи шляхів в R^n для дії групи $G=O(n, R)$, було отримано скінченну систему твірних цього поля й критерій G -еквівалентності систем шляхів. У роботі [6] розглядалися диференціальні твірні диференціального поля скінченного числа поверхонь для дії групи $O(2, R)$ в R^2 . У роботах [8], [9] розглядаються узагальнені лінійчаті поверхні в m -вимірному евклідовому просторі. Монографія [10] присвячена вивченню тривимірних лінійчатих поверхонь та їх застосуванню в техніці. У роботі [7] знайдена скінченна система диференціальних твірних диференціального поля лінійчатої поверхні для дії групи $O(3, R)$ в R^3 . У даній роботі розглядається аналогічна задача для скінченного числа лінійчатих поверхонь при дії групи $O(n, R)$ в R^n ($n \geq 2$).

Метою даної роботи є: визначення диференціального поля $O(n, R)$ -інваріантних диференціальних раціональних функцій від системи лінійчатих поверхонь в R^n та побудова скінченної системи твірних цього поля.

Означення 1. Шляхом у R^n називається неперервне відображення $x: R \rightarrow R^n$. Шлях називається C^∞ -шляхом, якщо його координати є нескінченно диференційованими на R функціями. Якщо x - C^∞ -шлях, через $x^{(k)}$ ($k \in N$) позначимо шлях, координати якого є похідні порядку k від координат x .

Означення 2. Нехай $V = R^n$, t й u є незалежними змінними над полем R , $x(t)$, $y(t) \in C^\infty$ - шляхи в просторі V , тоді вектор-функцію виду $z(t, u) = x(t) + uy(t)$ будемо називати лінійчатою поверхнею в просторі V .

Нехай $z_1(t, u), z_2(t, u), \dots, z_m(t, u)$ - лінійчаті поверхні в просторі V . d - многочленом від лінійчатих поверхонь назовемо многочлен від t, u , і скінченної кількості частинних похідних функцій, а d - раціональною функцією від $z_1(t, u), \dots, z_m(t, u)$ (позначимо її $f(z_1(t, u), \dots, z_m(t, u))$) - відношення d - многочленів від $z_1(t, u), z_2(t, u), \dots, z_m(t, u)$. Нехай $R\langle m \rangle$ - диференціальне поле d -раціональних функцій від системи лінійчатих поверхонь $z_1(t, u), \dots, z_m(t, u)$ в просторі V . Дію групи $G = O(n, R)$ в $R\langle m \rangle$ визначимо за формулою

$$(T_g f)(z_1(t, u), \dots, z_m(t, u)) = f(z_1(t, u)g, \dots, z_m(t, u)g),$$

де $g \in G$. Позначимо через $R\langle m \rangle^G$ -диференціальне підполе поля $R\langle m \rangle$ яке утворює множина всіх G -інваріантних d - раціональних функцій від вектор-функцій $z_1(t, u), z_2(t, u), \dots, z_m(t, u)$. Далі через (w, v) позначимо скалярний добуток векторів-функцій $w(t, u)$ і $v(t, u)$, а через $(w, v)_t$ і $(w, v)_u$ частинні похідні від нього по t і по u .

Теорема. Нехай $G = O(n, R)$. Такі системи d -многочленів є твірними диференціального поля $R\langle m \rangle^G$:

а) якщо $n=1$

$$(x_1 + uy_1, x_1 + uy_1) \quad (1)$$

б) якщо $n \geq 2$

$$\begin{pmatrix} (i) & (i) & (i) & (i) \\ x_1 + uy_1, x_1 + uy_1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\begin{pmatrix} (j+1) & (j+1) & (j) \\ x_1 + uy_1, y_1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\begin{pmatrix} (i) & (i) \\ x_1 + uy_1, x_1 + uy_1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

де $i = \overline{0, n-1}$; якщо $n=2l$ або $n=2l+1$, то $j = \overline{0, l-1}$; $r = \overline{1, m}$; $s = \overline{2, m}$.

Доведення. Відомо ([1]), що будь-яку G -інваріантну d -раціональну функцію d -поля $R\langle m \rangle^G$ можна представити у вигляді відношення відносних G -інваріантних d -многочленів однакової ваги. Для $G = O(n, R)$ є тільки дві ваги: 1) $\lambda_1(g) = 1, \forall g \in G$; 2) $\lambda_2(g) = \det g = \pm 1, g \in G$. У випадку 2) можна чисельник і знаменник помножити на відносний G -інваріант яким є покомпонентний визначник від вектор-функції $z_1(t, u)$ й її перших частинних похідних за t до $(n-1)$ порядку: $[z_1(t, u), z_1(t, u)', \dots, z_1(t, u)^{(n-1)}]$. В результаті одержимо в чисельнику й знаменнику G -інваріантні многочлени. Доведемо, що будь-який G -

інваріантний многочлен від $z_1(t, u), \dots, z_m(t, u)$ d-раціонально виражається через систему (1) (при $n=1$) або (2)-(4) (при $n \geq 2$). За першою основною теоремою теорії інваріантів для $G=O(n, R)$ ([2], стор.80) всякий G-інваріантний d-многочлен можна виразити як d-многочлен від G-інваріантних d-многочленів таких видів:

$$\left(\begin{smallmatrix} (v) & (v) & (\mu) & (\mu) \\ x_i + u y_i, x_q + u y_q \end{smallmatrix} \right) \quad (5)$$

$$\left(\begin{smallmatrix} (v) & (v) & (\mu) \\ x_i + u y_i, y_q \end{smallmatrix} \right) \quad (6)$$

$$\left(\begin{smallmatrix} (v) & (\mu) \\ y_i, y_q \end{smallmatrix} \right) \quad (7)$$

$i, q = \overline{1, m}; v, \mu \in Z_0^*$, де $Z_0^* = N \cup \{0\}$. Покажемо, що кожен з многочленів виду (5)-(7) d-раціонально виражається через d-многочлени (1) (при $n=1$), або (2)-(4) (при $n \geq 2$). Нам знадобляться такі леми.

Лема 1. Будь-який d-многочлен $\left(\begin{smallmatrix} (r_1) & (r_1) & (r_2) & (r_2) \\ x_1 + u y_1, x_1 + u y_1 \end{smallmatrix} \right)$ -ціло d-раціонально виражається через d-многочлени виду $\left(\begin{smallmatrix} (r) & (r) & (r) & (r) \\ x_1 + u y_1, x_1 + u y_1 \end{smallmatrix} \right)$, де $r \leq \left\lfloor \frac{r_1 + r_2}{2} \right\rfloor$.

Лема 2. Для будь-яких $2n+2$ векторів $a_0, a_1, \dots, a_{n-1}, a_n | b_0, b_1, \dots, b_{n-1}, b_n$ в просторі V справджується тотожність:

$$\begin{vmatrix} (a_0, b_0) & (a_0, b_1) & \dots & (a_0, b_n) \\ (a_1, b_0) & (a_1, b_1) & \dots & (a_1, b_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (a_n, b_0) & (a_n, b_1) & \dots & (a_n, b_n) \end{vmatrix} = 0 \quad (8)$$

Лема 3. Якщо $n \leq r$, то будь-який d-многочлен $\left(\begin{smallmatrix} (r) & (r) & (r) & (r) \\ x_1 + u y_1, x_1 + u y_1 \end{smallmatrix} \right)$ d-раціонально виражається через d-многочлени виду (1) (при $n=1, r=1$) або (2) (при $n \geq 2$).

Лема 4. Будь-який d-многочлен $\left(\begin{smallmatrix} (r_1) & (r_1) & (r_2) & (r_2) \\ x_1 + u y_1, x_1 + u y_1 \end{smallmatrix} \right)$ де $r_1, r_2 \in Z_0^*$, ціло d-раціонально виражається через d-многочлени $\left(\begin{smallmatrix} (r) & (r) & (r) & (r) \\ x_1 + u y_1, x_1 + u y_1 \end{smallmatrix} \right)$, де $k \leq r_1 + r_2, s = \overline{2, m}$.

Лема 5. Будь-який d-многочлен виду $\left(\begin{smallmatrix} (r) & (r) & (r) & (r) \\ x_1 + u y_1, x_s + u y_s \end{smallmatrix} \right)$, де $r \in Z_0^*, s = \overline{2, m}$ d-раціонально виражається через d-многочлени системи (1) (при $n=1$) або (2), (4) (при $n \geq 2$).

Лема 6. Будь-який d-многочлен виду $\left(\begin{smallmatrix} (r) & (r) & (r) & (r) \\ x_s + u y_s, x_s + u y_s \end{smallmatrix} \right)$ d-раціонально виражається через d-многочлени наступних видів $\left(\begin{smallmatrix} (a) & (a) & (b) & (b) \\ x_1 + u y_1, x_1 + u y_1 \end{smallmatrix} \right)$ й $\left(\begin{smallmatrix} (a) & (a) & (b) & (b) \\ x_s + u y_s, x_s + u y_s \end{smallmatrix} \right)$ де $a, b \in Z_0^*; k, s = \overline{2, m}$.

Лема 1-6 є узагальненнями на випадок лінійчатих поверхонь аналогічних лем, отриманих для шляхів в [5]. Доведення їх цілком аналогічні доведенням відповідних лем в [5].

Зауваження 1. В лемах 1 і 3, сформульованих для шляхів, встановлено, що будь-який d -многочлен виду $\binom{(r) (l)}{y_1, y_1}$, де $r, l \in Z_0^+$ d -раціонально виражається через d -многочлени $\binom{(r) (l)}{y_1, y_1}, \binom{(r) (l)}{y_1, y_1}, \binom{(n-1) (n-1)}{y_1, y_1}$. Для них мають місце рівності:

$$\binom{(i) (i)}{y_1, y_1} = \frac{1}{2} \binom{(i) (i)}{x_1 + u y_1, x_1 + u y_1}, \quad (i = \overline{0, n-1}).$$

Тому за лемами 1 й 3 для лінійчатих поверхонь одержуємо, що будь-який d -многочлен виду $\binom{(r) (l)}{y_1, y_1}$ d -раціонально виражається через d -многочлени виду (1) (при $n=1, \tau=1$) або (2) (при $n \geq 2$).

Зауваження 2. Аналогічно, якщо у лемах 4, 5, 6 замість лінійчатих поверхонь $x_s + u y_s$ ($s = \overline{2, m}$) розглянути шляхи y_s ($s = \overline{2, m}$), то одержимо, що d -многочлени виду (6) d -раціонально виражаються через d -многочлени системи (1) (при $n=1$) або (2)-

(4) (при $n \geq 2$), а також d -многочлени виду $\binom{(i) (i)}{x_1 + u y_1, y_s}, i = \overline{0, n-1}; s = \overline{2, m}$.

Лема 7. а) Якщо $n=1$, то d -многочлени виду $\binom{(r) (r) (p)}{x_1 + u y_1, y_1}$, де $r, p \in Z_0^+$,

d -раціонально виражаються через d -многочлен виду $(x_1 + u y_1, x_1 + u y_1)$.

б) Якщо $n \geq 2$, то d -многочлени виду $\binom{(r) (r) (p)}{x_1 + u y_1, y_1}$, де $r, p \in Z_0^+$, d -раціонально виражаються через d -многочлени (2), а також d -многочлени:

$$\binom{(i+1) (i+1) (j)}{x_1 + u y_1, y_1} \quad j = \overline{0, n-2}. \quad (9)$$

Доведення. Частина а) випливає негайно з лема 3, а також тотожностей (8), записаних для таких систем лінійчатих поверхонь і шляхів

$$x_1 + u y_1, y_1 \mid x_1 + u y_1, y_1 \quad x_1 + u y_1, y_1 \mid x_1 + u y_1, x_1 + u y_1.$$

б) Напишемо тотожність (8) для таких систем поверхонь і шляхів

$$x_1 + u y_1, \dots, x_{n-1} + u y_{n-1}, y_1 \mid y_1, y_1, \dots, y_{n-1}, y_{n-1}.$$

Маємо

$$\begin{vmatrix} (x_1 + uy_1, y_1) & (x_1 + uy_1, \dot{y}_1) & \dots & \binom{(n-1)}{x_1 + uy_1, y_1} & \binom{(n)}{x_1 + uy_1, y_1} \\ (\dot{x}_1 + u\dot{y}_1, y_1) & (\dot{x}_1 + u\dot{y}_1, \dot{y}_1) & \dots & \binom{(n-1)}{\dot{x}_1 + u\dot{y}_1, y_1} & \binom{(n)}{\dot{x}_1 + u\dot{y}_1, y_1} \\ \binom{(n-2)}{x_1 + uy_1, y_1} & \binom{(n-2)}{x_1 + uy_1, \dot{y}_1} & \dots & \binom{(n-2)}{x_1 + uy_1, y_1} & \binom{(n-2)}{x_1 + uy_1, \dot{y}_1} \\ \binom{(n-1)}{x_1 + uy_1, y_1} & \binom{(n-1)}{x_1 + uy_1, \dot{y}_1} & \dots & \binom{(n-1)}{x_1 + uy_1, y_1} & \binom{(n-1)}{x_1 + uy_1, \dot{y}_1} \\ (y_1, y_1) & (y_1, \dot{y}_1) & \dots & \binom{(n-1)}{y_1, y_1} & \binom{(n)}{y_1, y_1} \end{vmatrix} = 0 \quad (10)$$

Покажемо, що всі елементи визначника, який стоїть у лівій частині тотожності (10), крім $\binom{(n-1)}{x_1 + uy_1, y_1}$ d-раціонально виражаються через d-многочлени видів (2) і (9). Елементи головної діагоналі визначника виражаються через d-многочлени (2) з рівностей

$$\binom{(r)}{x_1 + uy_1, y_1} = \frac{1}{2} \binom{(r)}{x_1 + uy_1, x_1 + uy_1}, \quad r \in Z_0^+, \quad (11)$$

Під елементами головної діагоналі визначника перебувають d-многочлени (9). Елементи нижніх рядків, крім останнього можна ціло d-раціонально виразити через d-многочлени (2), (9) по індукції за допомогою рівностей

$$\binom{(r)}{x_1 + uy_1, y_1} = \binom{(r-1)}{x_1 + uy_1, y_1} - \binom{(r-1)}{x_1 + uy_1, y_1}, \quad (12)$$

де $r \geq p+2$, $p \in Z_0^+$, $r \in N$. Аналогічно елементи визначника розташовані вище головної діагоналі можна виразити через d-многочлени (2), (9) використовуючи індукцію за допомогою рівностей

$$\binom{(r)}{x_1 + uy_1, y_1} = \binom{(r)}{x_1 + uy_1, y_1} - \binom{(r+1)}{x_1 + uy_1, y_1} \quad (13)$$

при $r \leq p+1$, $r \in Z_0^+$, $r \in Z_0^+$, $p \in N$. Тому у визначнику тотожності (10) всі елементи, крім $\binom{(n-1)}{x_1 + uy_1, y_1}$, ціло d-раціонально виражаються через

системи d-многочленів (2) і (9). Згідно з зауваженням 1 через ці ж системи d-многочленів виражається й будь-який d-многочлен виду $\binom{(q)}{y_1, y_1}$, $(q = \overline{1, n})$. Тому, через d-многочлени (2) і (9) d-раціонально

виражаються й многочлени $\binom{(n-1)}{x_1 + uy_1, y_1}$. Крім того з рівностей

$$\binom{(a)}{x_1 + uy_1, y_1} = \binom{(a-1)}{x_1 + uy_1, y_1} - \binom{(a-1)}{x_1 + uy_1, y_1} \quad (14)$$

при $\alpha = n$, маємо, що для будь-яких $r, p \leq n$ d-многочлен $\binom{(r)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(r)}{y_1} \binom{(p)}{y_1}$ d-раціонально виражається через d-многочлени (2) і (9). Припустимо, що твердження леми справджується для будь-яких $r, p \leq k$ ($n \leq k$). З рівностей:

$$\binom{(i)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(r)}{y_1} \binom{(p+1)}{y_1} = \binom{(i)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(r)}{y_1} \binom{(p)}{y_1} + \binom{(i+1)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(r+1)}{y_1} \binom{(p)}{y_1}$$
$$\binom{(p+1)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p+1)}{y_1} \binom{(i)}{y_1} = \binom{(p)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p)}{y_1} \binom{(i)}{y_1} + \binom{(p)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p)}{y_1} \binom{(i+1)}{y_1}$$

де $i \leq p-1$, і припущення індукції одержуємо, що d-многочлени $\binom{(i)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(r)}{y_1} \binom{(p+1)}{y_1}$ і $\binom{(p+1)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p+1)}{y_1} \binom{(i)}{y_1}$ при будь-яких $i, j \leq p-1$ d-раціонально виражаються через d-многочлени (2) і (9). Напишемо тотожність (8) для таких систем лінійчатих поверхонь і шляхів:

$$\binom{(p+1-n)}{x_1+u y_1, \dots, x_1+u y_1, y_1} \binom{(p+1-n)}{y_1, \dots, y_1, y_1} \binom{(p)}{y_1} \binom{(p)}{y_1} \binom{(p+1-n)}{y_1} \binom{(p+1-n)}{y_1} \binom{(p+2-n)}{y_1} \binom{(p)}{y_1} \binom{(p+1)}{y_1}$$

Дана тотожність має такий вигляд:

$$\begin{vmatrix} \binom{(p+1-n)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p+1-n)}{y_1} \binom{(p+1-n)}{y_1} & \dots & \binom{(p)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p)}{y_1} \binom{(p+1-n)}{y_1} & \binom{(p+1-n)}{y_1} \binom{(p+1-n)}{y_1} \\ \binom{(p+1-n)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p+1-n)}{y_1} \binom{(p+2-n)}{y_1} & \dots & \binom{(p)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p)}{y_1} \binom{(p+2-n)}{y_1} & \binom{(p+1-n)}{y_1} \binom{(p+2-n)}{y_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \binom{(p+1-n)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p+1-n)}{y_1} \binom{(p)}{y_1} & \dots & \binom{(p)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p)}{y_1} \binom{(p)}{y_1} & \binom{(p+1-n)}{y_1} \binom{(p)}{y_1} \\ \binom{(p+1-n)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p+1-n)}{y_1} \binom{(p+1)}{y_1} & \dots & \binom{(p)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p)}{y_1} \binom{(p+1)}{y_1} & \binom{(p+1-n)}{y_1} \binom{(p+1)}{y_1} \end{vmatrix} = 0$$

З вищесказаного й зауваження 1 видно, що у визначнику, який стоїть в лівій частині рівності всі елементи, крім $\binom{(p)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p)}{y_1} \binom{(p+1)}{y_1}$, d-раціонально виражаються через d-многочлени видів (2) і (9); тому через них d-раціонально виражається $\binom{(p)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p)}{y_1} \binom{(p+1)}{y_1}$, отже враховуючи тотожності (14), де $\alpha = p+1$, через d-многочлени виду (2) і (9) d-раціонально виражається многочлен $\binom{(p+1)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(p+1)}{y_1} \binom{(p)}{y_1}$. Лему доведено.

Лема 8. Будь-який многочлен виду $\binom{(i)}{x_1+u y_1, y_1} \binom{(i)}{y_1}$, де $i = \overline{0, n-1}$, $s = \overline{2, m}$, d-раціонально виражається через d-многочлени системи (1) (при $n=1$) або (2)-(4) (при $n \geq 2$)

Доведення. Для будь-яких $i = \overline{0, n-1}$ і для будь-яких $s = \overline{2, m}$ напишемо тотожність (8) для таких лінійчатих поверхонь і шляхів

$$x_1 + u y_1, \dots, x_{n-1} + u y_{n-1}, y_1 \left| x_1 + u y_1, \dots, x_{n-1} + u y_{n-1}, x_n + u y_n \right.$$

звідки виходить, що d -многочлен $\binom{(1)}{y_1, x_n + u y_n}$ d -раціонально виражається через системи многочленів (1) (при $n=1$) або (2), (4), (9) (при $n \geq 2$). Враховуючи тотожність

$$\binom{(1)}{x_1 + u y_1, y_n} = \binom{(1)}{x_1 + u y_1, x_n + u y_n} - \binom{(1)}{y_1, x_n + u y_n} \quad \text{для } d\text{-}$$

многочлена $\binom{(1)}{x_1 + u y_1, y_n}$, звідси відразу дістаємо твердження леми.

Лема 9. Якщо $n = 2l$ або $n = 2l + 1$ ($l \in \mathbb{N}$), то d -многочлен виду $\binom{(k+1)}{x_1 + u y_1, y_1}$, де $l \leq k \leq n-2$ d -раціонально виражається через d -многочлени видів (2) і (3).

Доведення. Нехай $n = 2l$. Для системи $2n + 2$ таких поверхонь і шляхів:
 $x_1 + u y_1, \dot{x}_1 + u \dot{y}_1, \dots, x_{l-1} + u y_{l-1}, \dot{y}_{l-1}, \dots, y_{l-1}, y_l \left| x_1 + u y_1, \dot{x}_1 + u \dot{y}_1, \dots, x_l + u y_l, x_{l+1} + u y_{l+1}, \dot{y}_{l+1}, \dots, y_{l+1} \right.$
запишемо тотожність (8). Всі d -многочлени в лівій частині так отриманої тотожності крім $\binom{(l+1)}{x_1 + u y_1, y_1}$ за допомогою тотожностей (11), (12), (13), і (14) можна ціло d -раціонально виразити через d -многочлени видів (2) і (3). Розглядаючи послідовно тотожність (8) для таких $2n + 2$ систем поверхонь і шляхів

$$\begin{aligned} & x_1 + u y_1, \dots, x_{l-1} + u y_{l-1}, \ddot{y}_{l-1}, \dots, y_l \left| x_1 + u y_1, \dots, x_l + u y_l, x_{l+1} + u y_{l+1}, \ddot{y}_{l+1}, \dots, y_{l+1} \right. \\ & \dots \\ & x_1 + u y_1, \dots, x_{l-2} + u y_{l-2}, y_{l-1}, \dots, y_l \left| x_1 + u y_1, \dots, x_l + u y_l, x_{l+1} + u y_{l+1}, y_{l+1}, \dots, y_{l+1} \right. \\ & \dots \\ & x_1 + u y_1, \dots, x_{l-2l} + u y_{l-2l}, y_{l-2l-1}, \dots, y_l \left| x_1 + u y_1, \dots, x_l + u y_l, x_{l+1} + u y_{l+1}, y_{l+1}, \dots, y_{l+1} \right. \end{aligned}$$

та міркуючи як і вище можна показати, що d -многочлени

$$\binom{(l+2)}{x_1 + u y_1, y_1}, \dots, \binom{(2l-1)}{x_1 + u y_1, y_1}$$

d -раціонально виражаються через d -многочлени видів (2) і (3). При $n=2l+1$ доведення проводиться аналогічно. Однак на відміну від парного n починати його потрібно з тотожності (8), яку записано для $2n+2$ таких систем поверхонь і шляхів:

$$x_1 + u y_1, \dot{x}_1 + u \dot{y}_1, \dots, x_l + u y_l, y_l, \dot{y}_{l+1}, \dots, y_{l+1} \left| x_1 + u y_1, \dot{x}_1 + u \dot{y}_1, \dots, x_l + u y_l, x_{l+1} + u y_{l+1}, y_{l+1}, \dots, y_{l+1} \right.$$

Лему доведено.

Доведення теореми 1. Доведення теореми 1 отримуємо безпосереднім застосуванням лем 1-9 і зауважень 1 та 2.

Висновки. Згідно з доведеною теоремою, при довільному $n \geq 2$ диференціальне поле d -раціональних функцій скінченного числа лінійчатих поверхонь в R^n інваріантних щодо дії групи ортогональних перетворень має скінчену кількість твірних, система твірних явно побудована. Відкритими питаннями залишаються знаходження співвідношень між твірними і класифікація лінійчатих поверхонь за базисними інваріантами.

Література

1. Ж. Дьедонне, Дж. Керрол, Д. Мамфорд, Геометрическая теория инвариантов. - М.: Мир. 1974. - 280 с.
2. Г. Вейль, Классические группы, их инварианты и представления. - М.: Госиздат иностранной литературы, - 1947. - 408с.
3. Manuel Gonzalez, Raquel Gonzalo, Jesus Angel Jaramilo. Symmetric polynomials on Rearrangement - invariant function Spaces // J. London Math. Soc. - 1999. №2-p.1-17.
4. Р. Г. Арипов, Образующие дифференциального поля инвариантных дифференциальных рациональных функций путей для действий действительных ортогональных групп в R^n // Узбекский математический журнал. - 1992. - №1. - с. 3-7.
5. Дж. Хаджиев, Приложение теории инвариантов к дифференциальной геометрии кривых. ФАН, Ташкент, 1988. - 134 с.
6. Быкова Л.Я. Дифференциальные образующие дифференциального поля конечного числа параметризованных поверхностей для действия группы $O(2, R)$ в R^3 // Мат анализ, алгебра и теория вероятностей. - Ташкент, 1987. - С. 26-28. - Рус.
7. Shamilev T.M. About forming d -fields of differential invariants ruled surface for action of group $G = O(3, R)$ // В кн.: II-а літня школа з алгебри і топології. Львів-Долина. - 2-14 липня 2004. - С. 34.
8. Aumann G. Invarianten kegelpunktfreier $(k+1)$ - Gratregelflachen // J. Geom. - 1981, 16. №1-p.41-49.
9. Aumann G. Untersuchungen uber veralgemeinerte Regelflachen im euklidischen Raum E_m // RAD Jugosl. Akad. znan i umjetn. Mat. znan., - 1986. №5. - p.1-7.
10. Кривошалко С.Н. Торсовые поверхности и оболочки : справочник. - М.: Издательство университета дружбы народов, 1991. - 287с.

Надійшла до редакції 12.09.2005.

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ
РІВНЯННЯ,
МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА
ТА МЕХАНІКА

УДК 517.91/94

Олексій Ф. Калайда

Двосторонні лінійні методи чисельного інтегрування задачі Коші для явних рівнянь

За допомогою двосторонніх колокаційних многочленів з простими вузлами побудовано двосторонні автономні матричні методи типу Крилова та двосторонні різницьові методи типу Адамса безпосереднього чисельного інтегрування задачі Коші для явних диференціальних рівнянь. Проведено дослідження методів.

Ключові слова: задача, метод, двосторонні

E-mail: akalayda@i.com.ua

Задачу Коші для явних диференціальних рівнянь чисельно інтегрують або після зведення її до еквівалентної задачі Коші для нормальної системи відповідними чисельними методами або безпосередньо за допомогою спеціальних чисельних методів [1]. У першому випадку при цьому застосовні і двосторонні чисельні методи [2]. Тут за допомогою двосторонніх колокаційних многочленів з простими вузлами аналогічно [2] будуються двосторонні матричні методи типу Крилова [3] та методи типу Адамса [1] безпосереднього чисельного інтегрування задачі Коші

$$y^{(m)} = f(x, W(y)), x \in [x_0, \bar{x}], W(y(x_0)), y, f \in \mathbb{R}^p, \quad (1)$$

(покомпонентно – задача Коші для явної системи

$$y_i^{(m)} = f_i(x, y_1, \dots, y_p, \dots, y_1^{(m-1)}, \dots, y_p^{(m-1)}), i = \overline{1, p}, \quad (1')$$

де $y^{(m)} = (y_1^{(m)} \dots y_p^{(m)})^T$ – вектор старших похідних, $W(y) = (y^T \dots y^{(m-1)T})^T$ – матриця Вронського функції y [4], $y^{(m-1)} = (y_1^{(m-1)} \dots y_p^{(m-1)})^T$, $m_j - i \geq 0$, W_0 – відповідна їй числова матриця початкових значень $y_{j,0}^{(i)} = y_j^{(i)}(x_0)$, $i = \overline{0, m_j - 1}$, $j = \overline{0, p}$, f – достатньо гладка (кусково-гладка) функція у відповідному околі початкової точки $(x_0, W_0) \in \mathbb{R}^{m+1}$. Задача (1) еквівалентна інтегральному рівнянню Вольтерра другого роду

$$W(y(x)) = W(\Phi(x - x_0))W_0 + \int_{x_0}^x W(g(x - s))f(s, W(y(s)))ds, \quad (2)$$

Oleksiy F. Kalaida

The double-side linear methods of numerical of integration the Cauchy's problem for evident equations

With the aid of double-side collocation polynomials with simple nodes double-side autonomous matrix methods type Krylov's and double-side directly methods type Adams of integration difference Cauchy's problem for evident equation are constructed. The methods are investigation.

Key Words: problem, method, double-side.

де $\Phi(x - x_0) = E_p (1 (x - x_0) \dots (x - x_0)^{m-1} / (m-1)!) -$ нормальна фундаментальна матриця,

$$g(x - s) = \begin{cases} E_p (x - s)^{m-1} / (m-1)!, & x \geq s, \\ 0, & x < s \end{cases}$$

- функція Коші [4] оператора $(d/dx)^m$ (E_p - одинична матриця p -го порядку) або, що те саме, системі p -компонентних рівнянь

$$y^{(i)}(x) = \Phi^{(i)}(x - x_0)W_0 + \frac{1}{(m-1-i)!} \int_{x_0}^x (x-s)^{m-1-i} f(s, W(y(s))) ds, \quad i = \overline{0, m-1}. \quad (2')$$

Отже, для побудови двосторонніх чисельних методів для задачі (1) досить такі методи побудувати для рівняння (2). Чисельні методи розв'язування інтегральних рівнянь будуються, зокрема, шляхом апроксимації інтеграла відповідними квадратурними формулами, причому ці формули можна будувати шляхом апроксимації колокаційним многочленом як підінтегральної функції, так і її складових частин. У випадку рівняння (2) таких можливостей є декілька. Нижче розглядатимуться найоптимальніші в певному розумінні варіанти. Перший, коли в рівнянні (2) апроксимується лише функція f , другий, коли в (2') при $i = \overline{0, m-2}$ апроксимується вираз $(x-s)f(s, W(y(s)))$, а при $i = m-1$ - функція f . У першому варіанті досягається найвищий порядок точності апроксимації, у другому - при меншому на одиницю порядкові точності максимальна простота неявних методів.

1. Побудова двосторонніх методів типу Крилова. Перший варіант. Побудуємо для функції f за простими вузлами $x_0, \dots, x_n$ та за вузлами $x_1, \dots, x_{n+1}$ двосторонні многочлени типу Лагранжа одного і того ж порядку [2]

$$\begin{aligned} \hat{P}_n(s) &= P_n(s; x_0, \dots, x_n) = \sum_{j=0}^n \hat{\omega}_j(s) f_j = \hat{\Omega}(s) \hat{Y}(f), \\ \check{P}_n(s) &= \check{P}_n(s; x_1, \dots, x_{n+1}) = \sum_{j=1}^{n+1} \check{\omega}_j(s) f_j = \check{\Omega}(s) \check{Y}(f), \end{aligned} \quad (3)$$

де $f_j = f(x_j, W(y(x_j)))$, $\hat{\Omega}(s) = \hat{\beta}(s) \hat{V}^{-1}(\hat{\beta})$, $\check{\Omega}(s) = \check{\beta}(s) \check{V}^{-1}(\check{\beta})$ - відповідні нормальні матриці базисних функцій $\hat{\omega}_j, \check{\omega}_j$ ($\hat{\beta}(s), \check{\beta}(s)$ - матриці елементарних базисних функцій $\hat{\beta}_j, \check{\beta}_j$, $\hat{V}(\hat{\beta}), \check{V}(\check{\beta})$ - відповідні їм матриці Вандермонда), $\hat{Y}(f), \check{Y}(f)$ - вектори значень f_j функції f у вузлах x_j . Замінивши в (2) вираз $f(s, W(y(s)))$ многочленами (3) та поклавши $x_0 = x_1$, $x = x_{n+1}$, дістанемо ($h_i = x_{i+1} - x_i$)

$$W(\bar{y}_{i+1}) = W(\Phi(h_i))W(\bar{y}_i) + \sum_{j=0}^n \hat{A}_{ij} \bar{f}_j, i = \overline{0, n}, \quad (4)$$

$$W(\tilde{y}_{i+1}) = W(\Phi(h_i))W(\tilde{y}_i) + \sum_{j=1}^{n+1} \tilde{A}_{ij} \tilde{f}_j, i = \overline{0, n},$$

$$\bar{f}_j = f(s_j, W(\bar{y}_j)), \tilde{f}_j = f(s_j, W(\tilde{y}_j)),$$

$$\hat{A}_{ij} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} W(g(x_{i+1} - s)) \hat{\omega}_j(s) ds, \tilde{A}_{ij} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} W(g(x_{i+1} - s)) ds$$

- m - блокові матриці квадратурних коефіцієнтів (кожний з блоків є діагональна матриця p -го порядку з рівними між собою діагональними елементами),

$$\hat{A}_{ij} = \frac{E_p}{(m-1-\nu)!} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - s)^{m-1-\nu} \hat{\omega}_j(s) ds = \frac{E_p h_i^{m-\nu}}{(m-1-\nu)!} \hat{a}_{ij}, \quad (5)$$

$$\tilde{A}_{ij} = \frac{E_p}{(m-1-\nu)!} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - s)^{m-1-\nu} \tilde{\omega}_j(s) ds = \frac{E_p h_i^{m-\nu}}{(m-1-\nu)!} \tilde{a}_{ij},$$

$$\nu = \overline{0, m-1}, \hat{a}_{ij} = O(1), \tilde{a}_{ij} = O(1).$$

Рівності (4) є незалежні між собою mp -компонентні системи алгебраїчних рівнянь (відносно невідомих $W(\bar{y}_i)$ та $W(\tilde{y}_i)$, $i = \overline{1, n+1}$); кожен з них при достатньо малих кроках h_i сітки вузлів x_i можна розв'язувати методом простих ітерацій [3], поклавши початкові наближення $W_0(\bar{y}_i)$, $W_0(\tilde{y}_i)$, наприклад, рівними W_0 (у випадку лінійної відносно $W(y)$ функції f система (4) лінійна і її можна розв'язувати також відповідними методами лінійної алгебри). За побудовою випливає, що при цьому $y_i - \bar{y}_i \approx \approx y_i - \tilde{y}_i = O(h^{n+m+1})$, в той час як $y_i^{(m-1)} - \bar{y}_i^{(m-1)} \approx y_i^{(m-1)} - \tilde{y}_i^{(m-1)} = O(h^{n+2})$, де $h = \max h_i$. В цьому, як бачимо, перевага безпосереднього чисельного інтегрування задачі (1) перед чисельним інтегруванням еквівалентної їй задачі Коші для нормальної системи, бо при інтегруванні цієї системи двосторонніми методами дістали б двосторонні наближення $\bar{y}_i, \tilde{y}_i$ лише з похибкою $O(h^{n+2})$. Так, наприклад, для задачі $y' = y$, $y^{(0)}(0) = 1$, $i = \overline{0, 9}$, при $h = 0.5$, $n = 0$ з (4) знаходимо наближення з похибками $y_1 - \bar{y}_1 \approx 2^{-11}/11!$, $y_1 - \tilde{y}_1 \approx -2^{-11}/11!$, в той час як при інтегруванні задачі Коші для еквівалентної нормальної системи $Y_i' = Y_{i+1}$, $i = \overline{0, 9}$, $Y_{10}' = Y_1$ ($Y_1 = y$) дістаємо двосторонні наближення $\bar{y}_1, \tilde{y}_1$ лише з похибками $y_1 - \bar{y}_1 \approx 0.148$, $y_1 - \tilde{y}_1 \approx \approx -0.352$.

Формули (4) можна використовувати або в одноблочному режимі, тобто лише один раз при $i \leq \bar{n}$, де $x_{n+1} = \bar{x}$, або у многоблочному режимі, тобто послідовно при $i \leq n_1$, $n_1 + 1 \leq i \leq n_2$, ..., $n_{k-1} + 1 \leq i \leq n_k$, де $x_{n_k+1} = \bar{x}$. Пер-

ший режим, очевидно, придатний для відносно малого відрізка $[x_0, \bar{x}]$, другий - для відрізка значної довжини.

Другий варіант. Як було сказано, другий варіант двосторонніх методів типу (4) будуватимемо апроксимуванням в (2') за допомогою многочленів (3) при $i = \overline{0, m-2}$ виразу $(x-s)f(s, W(y(s)))$, а при $i = m-1$ функції f . Але, оскільки в околі D точки $x = s$ $g \in C^{m-2}(D)$, апроксимувати вираз $(x-s)f(s, W(y(s)))$ з використанням в (3) і вузлів $x_j > x$, як це було в першому варіанті, не доцільно (бо тоді при $n > m-2$ і порядок точності апроксимації інтеграла в (2) буде нижчий, і, можливо, двосторонності наближень не буде). Тому автономні матричні методи у другому варіанті можна побудувати або за допомогою пар многочленів $\tilde{P}_k(s; x_0, \dots, x_k)$, $\tilde{P}_k(s; x_1, \dots, x_{k+1})$, $x_0 \leq s \leq x_{k+1}$, зростаючого порядку, або пар многочленів $\tilde{P}_n(s; x_{-n+k}, \dots, x_k)$, $\tilde{P}_n(s; x_{-n+k+1}, \dots, x_{k+1})$, $s \in [x_{-n+k}, x_{k+1}]$, $k = \overline{0, n}$ одного і того ж порядку, але з використанням вузлів $x_j < x_0$. У першому випадку, проте, утворюються методи зростаючого порядку, а тому для їх двосторонності необхідні досить громіздкі допоміжні побудови, без яких верхні та нижні наближення на певних кроках можуть мінятися місцями.

У другому випадку дістаємо методи типу (4) - алгебраїчні рівняння

$$\tilde{y}_{z(k+1)}^{(i)} = \Phi^{(i)}(h_{zk})W(\tilde{y}_{zk}) + \begin{cases} \sum_{j=\overline{z(n-k)}}^{zk} \tilde{b}_{l, zk, j} \tilde{f}_j, k = 0, 2, \dots, \\ \sum_{j=\overline{z(n-k-1)}} \tilde{b}_{l, zk, j} \tilde{f}_j, k = 1, 3, \dots, i = \overline{0, m-2}, \end{cases}$$

$$\tilde{y}_{z(k+1)}^{(m-1)} = \tilde{y}_{zk}^{(m-1)} + \begin{cases} \sum_{j=\overline{z(n-k)}}^{zk} \tilde{b}_{m-1, zk, j} \tilde{f}_j, k = 0, 2, \dots, \\ \sum_{j=\overline{z(n-k-1)}}^{z(k+1)} \tilde{b}_{m-1, zk, j} \tilde{f}_j, k = 1, 3, \dots, \end{cases}$$

$$\tilde{y}_{z(k+1)}^{(i)} = \Phi^{(i)}(h_{zk})W(\tilde{y}_{zk}) + \begin{cases} \sum_{j=\overline{z(n-k-1)}}^{zk} \tilde{b}_{l, zk, j} \tilde{f}_j, k = 0, 2, \dots, \\ \sum_{j=\overline{z(n-k)}} \tilde{b}_{l, zk, j} \tilde{f}_j, k = 1, 3, \dots, i = \overline{0, m-2}, \end{cases}$$

$$\tilde{y}_{z(k+1)}^{(m-1)} = \tilde{y}_{zk}^{(m-1)} + \begin{cases} \sum_{j=\overline{z(n-k-1)}}^{z(k+1)} \tilde{b}_{m-1, zk, j} \tilde{f}_j, k = 0, 2, \dots, \\ \sum_{j=\overline{z(n-k)}} \tilde{b}_{m-1, zk, j} \tilde{f}_j, k = 1, 3, \dots, \end{cases} \quad (6)$$

де

$$\hat{b}_{ij} = E_p \frac{x_{r+1} - x_j}{(m-1-j)!} \int_{x_r}^{x_{r+1}} (x_{r+1} - s)^{m-2-j} \hat{\omega}_j(s) ds, i = \overline{0, m-2},$$

$$\bar{b}_{ij} = E_p \frac{x_{r+1} - x_j}{(m-1-j)!} \int_{x_r}^{x_{r+1}} (x_{r+1} - s)^{m-2-j} \bar{\omega}_j(s) ds, i = \overline{0, m-2},$$

$$\hat{b}_{m-1,r,j} = E_p \int_{x_r}^{x_{r+1}} \hat{\omega}_j(s) ds, \bar{b}_{m-1,r,j} = E_p \int_{x_r}^{x_{r+1}} \bar{\omega}_j(s) ds.$$

Як і в першому варіанті, ці рівняння при достатньо малих кроках інтегрування можна розв'язувати методом простих ітерацій. Проте методи другого варіанту мають на одиницю нижчий порядок точності.

Як і в (4), методи (6) також можна використовувати як в одноблочному, так і в многоблочному режимах.

2. Побудова двосторонніх методів типу Адамса. Перший варіант. Припустимо, що вектори $W(\hat{y}_j), W(\bar{y}_j), j = \overline{0, n}$ (n фіксоване) відомі (знайдені, наприклад, за допомогою методів типу Крилова). Тоді з рівності (4) при $i = n+k, k = 0, 1, \dots$ і парному n дістаємо рівність

$$W(\hat{y}_{n+k+1})W(\Phi(h_{n+k}))W(\hat{y}_{n+k}) + \sum_{j=k}^{n+k} \hat{A}_{n+k,j} \hat{f}_j, k = 0, 1, \dots, \quad (7)$$

та рівняння (відносно $W(\bar{y}_{n+k+1})$)

$$W(\bar{y}_{n+k+1}) = W(\Phi(h_{n+k}))W(\bar{y}_{n+k}) + \sum_{j=k+1}^{n+k+1} \bar{A}_{n+k,j} \bar{f}_j, k = 0, 1, \dots \quad (8)$$

(у випадку непарного n межі підсумовування в (7), (8) та коефіцієнти $\hat{A}_{n+k,j}, \bar{A}_{n+k,j}$ слід поміняти місцями; якщо ж $W(\hat{y}_j) = W(\bar{y}_j) = W(y_j)$, то рівності (7), (8) годяться для обох випадків). При достатньо малому h_{n+k} це рівняння можна розв'язувати методом простої ітерації.

З (7), (8) дістаємо двосторонні наближення розв'язку рівняння (2) і, зокрема, розв'язку задачі (1) з тим же порядком похибки методу, що й у першому варіанті методів типу Крилова.

Другий варіант. Поклавши в (6) з верхнім знаком в індексах та межах підсумовування $n+k$ замість k , у випадку парного n дістанемо рівності

$$\hat{y}_{n+k+1}^{(i)} = \Phi^{(i)}(h_{n+k})W(\hat{y}_{n+k}) + \sum_{j=k}^{n+k} \hat{b}_{i,n+k,j} \hat{f}_j, i = \overline{0, m-1}, k = 0, 1, \dots, \quad (9)$$

$$\bar{y}_{n+k+1}^{(i)} = \Phi^{(i)}(h_{n+k})W(\bar{y}_{n+k}) + \sum_{j=k+1}^{n+k+1} \bar{b}_{i,n+k,j} \bar{f}_j, i = \overline{0, m-2} \quad (10)$$

та рівняння (відносно $\bar{y}_{n+k+1}^{(m-1)}$)

$$\bar{y}_{n+k+1}^{(m-1)} = \bar{y}_{n+k}^{(m-1)} + \sum_{j=k+1}^{n+k+1} \bar{b}_{m-1,n+k,j} \bar{f}_j, k = 0, 1, \dots \quad (11)$$

(у випадку парного n в рівностях (9) - (11) слід зробити ті ж перестановки,

що й в рівностях (7), (8)).

При достатньо малих h_{n+k} рівняння (11) можна розв'язувати методом простої ітерації.

З рівностей (9) - (11) дістаємо двосторонні наближення розв'язку рівняння (2) (а отже, і розв'язку задачі (1)) з меншим на одиницю порядком похибки методу при $i = 0, m - 2$, ніж у попередньому варіанті.

З а у в а ж е н н я 1. Обчислення квадратурних коефіцієнтів $\tilde{A}_y, \tilde{A}_x$ в рівностях (4), (7), (8) та коефіцієнтів $\tilde{b}_{ij}, \tilde{b}_{ij}$ в рівностях (6), (9) - (11) зручно здійснювати за допомогою матричних алгоритмів чисельного інтегрування [5]. Тоді у випадку, наприклад, многочленів Лагранжа (3) для обчислення квадратурних коефіцієнтів в рівностях (4), (7), (8) досить, згідно (5), (3), зінтегрувати у вказаних межах матриці $(x_r - s)\beta(s)$, а в рівностях (6), (9) - (11) - матриці $(x_r - s)^{m-2-i}\beta(s)$, де $\beta(s) = (1(s - x_r) \dots (s - x_r)^n)$, та одержані числові матриці помножити на обернені матриці Вандермонда $\tilde{V}^{-1}(\beta), \tilde{V}^{-1}(\beta)$.

3. Дослідження методів. Встановимо умови збіжності методу простої ітерації для алгебраїчних рівнянь (4), (6), (8), (11), двосторонності побудованих методів, дослідимо їх на стійкість та збіжність. Розглянемо детально, наприклад, методи типу Адамса (7), (8).

Теорема 1. Для збіжності методу простої ітерації для рівняння (8) достатньо виконання умови

$$q = \tilde{a}L_W < 1, \quad (12)$$

де $\tilde{a}$ - максимальна за абсолютною величиною компонента вектора $\tilde{A}_{n+k+1, n+k+1}$, L_W - стала Ліпшиця функції f відносно змінної $W(y)$.

Доведення. З (8) маємо нерівності ($\|\cdot\|$ - перша норма вектора та матриці)

$$\|W(u_2) - W(u_1)\| \leq L_W \|\tilde{A}_{n+k, n+k+1}\| \|W(u_1) - W(u_0)\|$$

(u_0, u_1, u_2 - послідовні наближення $\tilde{y}_{n+k+1}$), які й доводять твердження теореми.

При заміні в (12) $\tilde{a}$ на $\|\tilde{b}_{m-1, n+k, n+k+1}\|$ твердження теореми справедливе і для рівняння (11), а при достатньо малих h_i також для рівнянь (4), (6).

Теорема 2. Формули (7), (8) на одному кроці інтегрування визначають наближення значень функції $y^{(i)}$ з похибками

$$\begin{aligned} \tilde{R}_{n+k, i}(f) &= O(h_{n+k}^{n+m+1-i} \tilde{\sigma}_{n+k, i} / (n+1)(m-1-i)!), \\ -\tilde{R}_{n+k, i}(f) &= O(h_{n+k}^{n+m+1-i} \tilde{\sigma}_{n+k, i} / (n+1)(m-1-i)!), \quad i = \overline{0, m-1}, \end{aligned} \quad (13)$$

де $\tilde{\sigma}_{n+k, i}, \tilde{\sigma}_{n+k, i}$ - сталі, $\tilde{\sigma}_{n+k, i}, \tilde{\sigma}_{n+k, i} \rightarrow 0, n \rightarrow \infty$.

Доведення. Дійсно, оскільки за побудовою

$$\begin{aligned}\hat{R}_{n+k}(f) &= \int_{x_{n+k}}^{x_{n+k+1}} W(g(x_{n+k+1}) - s) \frac{\bar{\rho}^{(n+1)}(\bar{c}_{n+k})}{(n+1)!} \prod_{v=k}^{n+k} (s - x_v) ds, \\ \tilde{R}_{n+k}(f) &= \int_{x_{n+k}}^{x_{n+k+1}} W(g(x_{n+k+1}) - s) \frac{\check{\rho}^{(n+1)}(\check{c}_{n+k})}{(n+1)!} \prod_{v=k+1}^{n+k+1} (s - x_v) ds,\end{aligned}\quad (14)$$

де $\bar{\rho} = f - \hat{P}_n$, $\check{\rho} = f - \tilde{P}_n$, $\bar{c}_{n+k}$, $\check{c}_{n+k}$ - середні точки, а при умові двосторонності многочленів (3) $\bar{\rho}_i^{(n+1)} \check{\rho}_i^{(n+1)} > 0$ і, крім того, $g(x_{n+k+1}) - s \geq 0$, $(s - x_{n+k+1}) \leq 0$, то за першою теоремою про середнє в інтегральному численні з (14) дістаємо оцінки

$$|\hat{R}_{n+k,l}(f)| \leq \frac{\bar{M} \bar{\sigma}_{n+k,l} h_{n+k}^{n+m+1-l}}{(n+1)!(m-i)!}, |\tilde{R}_{n+k,l}(f)| \leq \frac{\check{M} \check{\sigma}_{n+k,l} h_{n+k}^{n+m+1-l}}{(n+1)!(m-i)!},$$

де $\bar{M} \geq |\bar{\rho}_i^{(n+1)}|$, $\check{M} \geq |\check{\rho}_i^{(n+1)}|$, з яких і випливають асимптотичні оцінки (13), причому для них справджується нерівність $\hat{R}_{n+k,l}(f) \tilde{R}_{n+k,l}(f) > 0$ і $\hat{R}_{n+k,l}(f)$ - величини одного знака. Цим самим встановлено величину похибки апроксимації формулами (7), (8) рівняння (2).

Аналогічно можна показати, що у другому варіанті методів типу Адамса похибка апроксимації має на одиницю нижчий порядок.

Теорема 3. При умові двосторонності многочленів (3) і таких кроках h_i , що

$$Q = AL_{\bar{W}} \ll 1, \quad (15)$$

де

$$A = \max\left(\sum_{j=k}^{n+k} |\hat{A}_{n+k,j}|, \sum_{j=k+1}^{n+k+1} |\tilde{A}_{n+k,j}|\right),$$

методи (7), (8) для задачі (1) двосторонні.

Доведення. В разі двосторонності многочленів (3) в (2) та (7), (8) маємо рівності

$$\begin{aligned}\hat{e}_{n+k+1} &= W(\Phi(h_{n+k})) \hat{e}_{n+k} + \sum_{j=k}^{n+k} \hat{A}_{n+k,j}(f'_W)_{\bar{c}_j} \hat{e}_j + \hat{R}_{n+k}(f), \\ \tilde{e}_{n+k+1} &= W(\Phi(h_{n+k})) \tilde{e}_{n+k} + \sum_{j=k+1}^{n+k+1} \tilde{A}_{n+k,j}(f'_W)_{\check{c}_j} \tilde{e}_j + \tilde{R}_{n+k}(f),\end{aligned}\quad (16)$$

де $\hat{e} = W(y - \bar{y})$, $\tilde{e} = W(y - \check{y})$, $\bar{c}_j$, $\check{c}_j$ - середні точки околу точки $(x_j, W(y_j))$, $\hat{R}_{n+k}(f)$, $\tilde{R}_{n+k}(f)$ - залишкові члени використовуваних в (7), (8) квадратурних формул. Оскільки $W(\Phi(h_{n+k})) > 0$, $\hat{R}_{n+k,l}(f) \tilde{R}_{n+k,l}(f) > 0$, а за припущенням $\hat{e}_j \tilde{e}_j < 0$ (усі компоненти $\hat{e}_{\bar{c}_j}$, $\tilde{e}_{\check{c}_j}$ відповідно векторів $\hat{e}_j$, $\tilde{e}_j$ - величини одного і того ж знака), то при умові (15) з (16) випливає, що величини $\hat{e}_{n+k+1,j} - \tilde{e}_{n+k+1,j}$ теж одного і того ж знака, і $\hat{e}_{n+k+1,j} \tilde{e}_{n+k+1,j} < 0$, що й треба було довести.

З а у в а ж е н н я 2. З теореми слідує, зокрема, що екстраполяційні

та інтерполяційні методи Адамса [1] одного і того ж порядку являються двосторонніми.

Дослідимо методи (7), (8) на стійкість. Спочатку розглянемо випадок рівняння $y^{(m)} = f(x)$, тобто дослідимо формули (7), (8) без врахування в них впливу f'_w .

Теорема 4. Головна частина формул (7), (8) стійка.

Доведення. З (16) при $f'_w = 0$ маємо рекурентні рівності

$$\begin{aligned}\hat{\varepsilon}_{n+k+1} &= W(\Phi(x_{n+k+1} - x_n))\hat{\varepsilon}_n + W(\Phi(0))\hat{R}_{n+k} + \dots + W(\Phi(x_{n+k} - x_n))\hat{R}_n, \\ \check{\varepsilon}_{n+k+1} &= W(\Phi(x_{n+k+1} - x_n))\check{\varepsilon}_n - W(\Phi(0))\check{R}_{n+k} + \dots + W(\Phi(x_{n+k} - x_n))\check{R}_n,\end{aligned}\quad (17)$$

звідки при інтегруванні задачі (1) на скінченному відрізку, враховуючи обмеженість векторів $\hat{R}_j, \check{R}_j$ (теорема 2), переконуємось в справедливості твердження теореми.

З а у в а ж е н н я 3. При $h_j = h$, $f'_w = 0$ з (16) дістаємо однорідне різницеве векторне рівняння $\varepsilon_{n+k+1} = W(\Phi(h))W_{n+k}$. Воно має лише одне характеристичне число $\lambda = 1$ (кратне). Однак, як бачимо, це не загрожує стійкості методу. Таке явище характерне для усіх стійких методів в разі їх застосування до систем диференціальних рівнянь (так, наприклад, у випадку методу Ейлера $y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n)$ і векторного рівняння $y' = f(x, y)$ маємо характеристичне рівняння $\det(E\lambda - E) = 0$, корінь якого теж кратний, але це аж ніяк не означає, що метод не стійкий). Порівняння рівностей (17) при $m=1$ та $m>1$ показує, що при $m \gg 1$ похибки накопичуються все-таки швидше, ніж при $m=1$ (при $m=1$ $W(\Phi) = E$). Тому при досить великих m швидкість накопичення похибок можна послабити, звівши задачу (1) до еквівалентної задачі для системи r рівнянь m_i -го порядку ($m_1 + \dots + m_r = m$), або застосувавши розглянуті тут методи в режимі зростаючого порядку точності (тобто при фіксованому k і зростаючому n , тоді порядок похибки методу визначатиметься мінімальним порядком похибки застосовуваних квадратурних формул зростаючого порядку точності [6]) або, нарешті, використовувати квадратурні формули з тим більшою кількістю вузлів для знаходження набліжень $\hat{y}_{n+k+1}^{(m-i)}, \check{y}_{n+k+1}^{(m-i)}$, $i = \overline{1, m}$ чим менше i , щоб зрівняти порядок точності похибок (13). Крім того, визначивши ступінь асиметрії вилок $\hat{y}_j^{(i)} - \check{y}_j^{(i)}$ по відношенню до похибок $y_j^{(i)} - \hat{y}_j^{(i)}$, $y_j^{(i)} - \check{y}_j^{(i)}$, на кожному кроці інтегрування відповідним чином в формулах (7), (8) по чергово (або епізодично) міняти місцями квадратурні формули, так що в рівностях (17) суми стануть знакопочережними, а отже, зменшиться і швидкість накопичення похибок.

Розглянемо, нарешті, загальний випадок $y^{(m)} = f(x, W(y))$. З рівностей (16) для норм векторів $\hat{\varepsilon}_j, \check{\varepsilon}_j$ маємо скалярні різницеві рівняння (вважа-

ємо крок інтегрування сталим та використовуємо першу або другу норми векторів та матриць)

$$\hat{\omega}_{n+k+1} = \kappa \hat{\omega}_{n+k} + hL_w \sum_{j=k}^{n+k} \hat{\alpha}_j \hat{\omega}_j + \bar{l}, \quad \tilde{\omega}_{n+k+1} = \kappa \tilde{\omega}_{n+k} + hL_w \sum_{j=k+1}^{n+k+1} \tilde{\alpha}_j \tilde{\omega}_j + \bar{l}, \quad (18)$$

де

$$1 \leq \kappa = \|W(\Phi(h))\| \leq e^h, \quad \bar{l} = \max \| \hat{R}_j(f) \|, \quad \tilde{l} = \max \| \tilde{R}_j(f) \|, \quad \hat{\alpha}_j = \max \| \hat{A}_{r,j} \| h^{-1},$$

$$\tilde{\alpha}_j = \max \| \tilde{A}_{r,j} \| h^{-1}, \quad r = \overline{0, n+k+1}, \quad \text{і відповідні їм характеристичні рівняння}$$

$$\hat{\varphi}(\lambda) = \lambda^{n+1} - \kappa \lambda^n - hL_w \sum_{j=0}^n \hat{\alpha}_j \lambda^j = 0, \quad \tilde{\varphi}(\lambda) = \lambda^n - \kappa \lambda^{n-1} - hL_w \sum_{j=0}^n \tilde{\alpha}_j \lambda^j = 0. \quad (19)$$

Бачимо, що $\hat{\varphi}(\kappa) < 0$, $\tilde{\varphi}(\kappa) < 0$. Крім того, $\hat{\varphi}(\kappa\beta) > 0$, $\tilde{\varphi}(\kappa\beta) > 0$, де $\beta = 1 + hL_w \hat{\alpha}$, $\tilde{\beta} = 1 + hL_w \tilde{\alpha}$, $\hat{\alpha} = \sum_{j=0}^n \hat{\alpha}_j$, $\tilde{\alpha} = \sum_{j=0}^n \tilde{\alpha}_j$. Отже, перше рівняння (19) має корінь $\hat{\lambda}_1 \in (\kappa, \kappa\beta)$, друге рівняння при $hL_w \tilde{\alpha} < 1$ – корінь $\tilde{\lambda}_1 \in (\kappa, \kappa\tilde{\beta})$.

Теорема 5. Для розв'язків рівнянь (18) справедливі оцінки (при $hL_w \tilde{\alpha} < 1$).

$$\hat{e}_{n+k+1} \leq \hat{e} \exp(\bar{d}) + \bar{l} (\exp(\bar{d}) - 1) / hL_w \hat{\alpha}, \quad \bar{d} = (\hat{\alpha} L_w + 1)(x_{n+k+1} - x_n), \quad (20)$$

$$\tilde{e}_{n+k+1} \leq \tilde{e} \exp(\tilde{d}) + \tilde{l} (\exp(\tilde{d}) - 1) / hL_w \tilde{\alpha}, \quad \tilde{d} = (\tilde{\alpha} L_w + 1)(x_{n+k+1} - x_n).$$

Доведення. Доведення теореми повністю співпадає з доведенням аналогічних оцінок для методів Адамса для нормальних рівнянь [1, стор. 360 - 364] з врахуванням оцінки $\kappa < e^h$ (в цитованій роботі не вказано скінченного інтервала розташування кореня $\hat{\lambda}_1$ другого рівняння (19)).

Оцінки (20) показують, що досліджувані двосторонні методи стійкі, а з врахуванням оцінок (13) і збіжні.

П р и к л а д. Задача Коші $y'' = y$, $y^{(i)}(0) = 1$, $i = \overline{0, 2}$, розв'язувалась безпосередньо двома варіантами двосторонніх методів Адамса при $n = 0$, $h = 0.2$, а також першим варіантом цих методів розв'язувалась еквівалентна цій задачі задача Коші для системи $z' = u$, $u' = v$, $v' = z$. Крім того, вихідна задача розв'язувалась першим варіантом методів Адамса з корекцією асиметрії вилки $\bar{y}_i^{(n)} - \bar{y}_i^{(n)}$, $i = \overline{0, 2}$ на кожному кроці інтегрування з відповідним уточненням наближеного розв'язку. Похибки наближеного розв'язку та його похідних в точці $x = 1$ (після п'яти кроків інтегрування) наведені в таблиці (колонка I – перший варіант методів Адамса, колонка II – другий, колонка III – інтегрування еквівалентної нормальної системи першим варіантом методів Адамса, колонка IV – перший варіант з корекцією вилки та уточненням).

варіанти похибки	I	II	III	IV
$\hat{\delta}_i$	0.0310	- 0.046	0.230	- 0.000762

$\tilde{\delta}_5$	- 0.0248	0.049	- 0.334	- 0.000762
$\tilde{\delta}_5^*$	0.085	- 0.15	0.230	- 0.002543
$\tilde{\delta}_5^*$	- 0.082	0.113	- 0.334	- 0.002543
$\tilde{\delta}_5^*$	0.171	0.156	0.230	- 0.006133
$\tilde{\delta}_5^*$	- 0.186	- 0.157	- 0.334	- 0.006133

Відзначимо, що у випадку I - III двосторонність для компонент векторів $W(y_k)$ наявна в усіх вузлах.

З а у в а ж е н н я 4. З дещо меншим порядком можна зі значно меншим обсягом очислень добути двосторонні наближення розв'язку, якщо використати матричні формули чисельного диференціювання [7] при обчисленні аргументів $y^{(i)}, i = \overline{1, m-1}$, функції f . При цьому, замість системи (2'), використовуватиметься лише її перша компонента при $i = 0$.

Література

1. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. В 2-х т. Т. 2. М. 1959. - 620 с.
2. Калайда А.Ф. Двусторонние линейные методы численного решения задачи Коши для нормальных уравнений //Вычисл. и прикл. матем. К., 1992. Вып. 73. - С. 3 - 14.
3. Калайда А.Ф. Автономные матричные методы численного решения задачи Коши для одномерных дифференциальных уравнений первого порядка //Вычисл. и прикл. матем. К., 1983. Вып. 49. - С. 14 - 24.
4. Ляшко И.И., Боярчук А.К., Гай Я.Г., Калайда А.Ф. Математический анализ (в 3 ч.). Ч. 3. К. 1987. - 344 с.
4. Калайда А.Ф. Матричные алгоритмы численного интегрирования //Вычисл. и прикл. матем. К., 1989. Вып. 68. - С. 3 - 14.
5. Чирихалов В.А. Решение интегрального уравнения Вольтерра с применением квадратурных формул возрастающего порядка точности //Вычисл. и прикл. матем. К., 1981. Вып. 43. - С. 147 - 152.
6. Калайда А.Ф. Матричные алгоритмы численного дифференцирования функций //Вычисл. и прикл. матем. К., 1982. Вып. 46. - С. 7 - 13.

Надійшла до редакції 17.10.2005

УДК 517.9

Андрій П. Крєневич*

Andriy P. Krenevych*

**Асимптотична
еквівалентність
квазілінійних
систем Іто**

**розв'язків
стохастичних**

Досліджується питання
асимптотичної еквівалентності
стохастичних систем лінійних звичайних
і стохастичних квазілінійних систем в
сенсі середнього квадратичного та з
ймовірністю одиниця.

Ключові слова: асимптотична
еквівалентність в середньому
квадратичному, асимптотична
еквівалентність з ймовірністю одиниця.

**Asymptotic equivalence of the
solutions of the semilinear stochastic
Ito systems**

We obtain the sufficient conditions of
asymptotic equivalence in mean square and
with probability one of linear ordinary and
stochastic semilinear Ito systems.

Key Words: asymptotic equivalence in
mean square, asymptotic equivalence with
probability one.

*E-mail: krenevich@univ.kiev.ua

1. Вступ

Якісна теорія систем стохастичних диференціальних рівнянь займає значне місце у загальних питаннях дослідження стохастичних рівнянь. Одним з найбільш важливих розділів даної теорії є вивчення стійкості розв'язків стохастичних систем в різних імовірнісних сенсах, наприклад, стійкість в середньому квадратичному, стійкість з ймовірністю одиниця, стійкість за ймовірністю. Досить широко дані питання висвітлені в монографіях [1], [2], [3] тощо.

У даній роботі використано інший підхід до вивчення асимптотичної поведінки розв'язків нелінійних стохастичних систем, а саме, відшукування систем звичайних лінійних диференціальних рівнянь, асимптотична поведінка розв'язків яких є подібною до поведінки розв'язків вихідної стохастичної системи. Таким чином, питання стійкості стохастичної системи зводиться до питання стійкості системи звичайних лінійних диференціальних рівнянь, що значно спрощує дослідження вихідної системи. Стохастичні системи, асимптотична поведінка розв'язків яких є подібною, аналогічно до звичайних диференціальних рівнянь (див. [4]), будемо називати асимптотично еквівалентними. Природно, що при дослідженні стохастичних систем, виникають поняття асимптотичної еквівалентності в різних імовірнісних сенсах. Автору відомі деякі результати досліджень у даному напрямку (див. наприклад, [5],[6]). Але в зазначених роботах вивчається питання асимптотичної еквівалентності в дещо іншому сенсі для автономних нелінійних стохастичних рівнянь.

В даній роботі отримано достатні умови асимптотичної

еквівалентності систем квазілінійних стохастичних диференціальних рівнянь Іто та систем звичайних лінійних диференціальних рівнянь в сенсі середнього квадратичного та з ймовірністю 1.

2. Основні поняття

Розглянемо систему звичайних лінійних диференціальних рівнянь

$$dx = Axdt, \quad (1)$$

за початковою умовою $x(t_0) = x_0$, $t \geq t_0 \geq 0, x \in R^n$, A – детермінована, стала матриця.

Поруч із системою (1) розглянемо систему стохастичних диференціальних рівнянь

$$dy = (Ay + f(t, y))dt + \sigma(t, y)dW_t, \quad (2)$$

за початковою умовою $y(t_0) = y_0$, де $f(t, y), \sigma(t, y)$ – неперервні за сукупністю аргументів n -вимірні функції, для яких виконується умова Ліпшиця по y , тобто існує $L \geq 0$, що для довільних $y, \tilde{y} \in R^n, t \geq t_0$:

$$|f(t, y) - f(t, \tilde{y})| + |\sigma(t, y) - \sigma(t, \tilde{y})| \leq L |y - \tilde{y}|.$$

W_t – стандартний скалярний вінерівський процес, визначений для $t \geq 0$, на імовірнісному просторі (Ω, F, P) ; $\{F_t, t \geq 0\}$ – потік σ -алгебр, з яким узгоджений процес W_t . Тоді, як відомо, система має єдиний сильний розв'язок $y(t) = y(t, \omega) \in R^n$, за початковою умовою $y(t_0) = y_0$.

Означення 1 Якщо кожному сильному розв'язку $y(t)$ системи (2) можна поставити у відповідність розв'язок $x(t)$ системи (1), такий, що

$$\lim_{t \rightarrow \infty} E |x(t) - y(t)|^2 = 0,$$

то система (2) називається асимптотично еквівалентною системі (1) в середньому квадратичному.

Означення 2 Якщо кожному сильному розв'язку $y(t)$ системи (2) можна поставити у відповідність розв'язок $x(t)$ системи (1), такий, що

$$P\{\lim_{t \rightarrow \infty} |x(t) - y(t)| = 0\} = 1,$$

то система (2) називається асимптотично еквівалентною системі (1) з ймовірністю 1.

3. Асимптотична еквівалентність в середньому квадратичному

Наступні теореми є узагальненнями теореми Левінсона (див., наприклад, [4]), перенесеної на випадок стохастичних систем нелінійних диференціальних рівнянь.

Теорема 1 Нехай розв'язки системи (1) обмежені на $[t_0, \infty)$. Тоді, якщо для всіх $t \geq t_0, y \in R^n$ існують невід'ємні функції $\beta(t)$ та $\delta(t)$, що

$$|f(t, y)| \leq \beta(t) |y|, \quad |\sigma(t, y)| \leq \delta(t) |y|,$$

причому

$$\int_{t_0}^{\infty} \beta(t) dt \leq K_1 < \infty, \quad \int_{t_0}^{\infty} \delta^2(t) dt \leq K_1 < \infty, \quad (3)$$

для деякого $K_1 > 0$, то система (2) асимптотично еквівалентна в середньому квадратичному системі (1).

• Доведення.

І) Оскільки розв'язки системи (1) обмежені, то характеристичні корені $\lambda(A)$ матриці A задовольняють нерівність $\operatorname{Re} \lambda(A) \leq 0$, причому характеристичні корені з нульовими дійсними частинами мають прості елементарні дільники.

Не втрачаючи загальності, будемо вважати, що матриця A має квазідіагональний вигляд $A = \operatorname{diag}(A_1, A_2)$, де A_1 і A_2 – відповідно $(p \times p)$ -та $(q \times q)$ -матриці ($p + q = n$) такі, що

$$\operatorname{Re} \lambda(A_1) \leq -\alpha < 0, \quad \operatorname{Re} \lambda(A_2) = 0. \quad (4)$$

Нехай $X(t) = \operatorname{diag}(e^{A_1 t}, e^{A_2 t})$ – фундаментальна матриця системи (1), нормована в нулі.

Покладемо $X(t) = X_1(t) + X_2(t)$, де $X_1(t) = \operatorname{diag}(e^{A_1 t}, 0)$ і $X_2(t) = \operatorname{diag}(0, e^{A_2 t})$.

Звідси матрицю Коші $\tilde{X}(t, \tau) = X(t)X^{-1}(\tau) = X(t - \tau)$ можна представити у вигляді $\tilde{X}(t, \tau) = X_1(t - \tau) + X_2(t - \tau)$, причому на основі оцінок (4) маємо

$$\|X_1(t)\| = \|e^{A_1 t}\| \leq a e^{-\alpha t} \text{ і } \|X_2(t)\| = \|e^{A_2 t}\| \leq b, \quad t \geq t_0 \geq 0,$$

де a, b, α – деякі додатні сталі.

Запишемо розв'язок задачі (2) за допомогою матриці Коші системи детермінованих диференціальних рівнянь (1) [1, ст.234].

$$y(t) = X(t - t_0)y(t_0) + \int_{t_0}^t X(t - \tau)f(\tau, y(\tau))d\tau + \\ + \int_{t_0}^t X(t - \tau)\sigma(\tau, y(\tau))dW_\tau, \quad t \geq t_0 \geq 0. \quad (5)$$

Враховуючи еволюційну властивість матрицанта перепишемо співвідношення (5) у наступному вигляді

$$y(t) = X(t - t_0) \left[y(t_0) + \int_{t_0}^{\infty} X_2(t_0 - \tau)f(\tau, y(\tau))d\tau + \int_{t_0}^{\infty} X_2(t_0 - \tau)\sigma(\tau, y(\tau))dW_\tau \right] + \\ + \int_{t_0}^t X_1(t - \tau)f(\tau, y(\tau))d\tau + \int_{t_0}^t X_1(t - \tau)\sigma(\tau, y(\tau))dW_\tau - \\ - \int_t^{\infty} X_2(t - \tau)f(\tau, y(\tau))d\tau - \int_t^{\infty} X_2(t - \tau)\sigma(\tau, y(\tau))dW_\tau. \quad (6)$$

Кожному розв'язку $y(t) \equiv y(t, \omega)$ системи (2), як випадковому процесу, за початковою умовою $y(t_0) = y_0$ поставимо у відповідність розв'язок $x(t)$ системи (1) за початковою умовою

$$x(t_0) = y(t_0) + \int_{t_0}^{\infty} X_2(t_0 - \tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau + \int_{t_0}^{\infty} X_2(t_0 - \tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau. \quad (7)$$

Оскільки розв'язок $x(t)$ лінійної системи (1) і сильний розв'язок $y(t) \equiv y(t, \omega)$ системи стохастичних диференціальних рівнянь (2) (див. [7]) визначаються початковими даними, то формула (7) визначає відповідність між множиною розв'язків $\{y(t) \equiv y(t, \omega)\}$ системи (2) та множиною розв'язків $\{x(t)\}$ системи (1).

II) Доведемо, що всі розв'язки системи (2) за умови (3) будуть обмеженими в середньому квадратичному.

Оскільки розв'язки системи (2) визначаються співвідношенням (5), то, враховуючи властивість стохастичного інтегралу [7] та нерівність Коші-Буняковського, оцінимо математичне сподівання $|y(t)|^2$.

$$\begin{aligned} E|y(t)|^2 &\leq 3\|X(t - t_0)\|^2 E|y(t_0)|^2 + 3E\left|\int_{t_0}^t X(t - \tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau\right|^2 + \\ &+ 3E\left|\int_{t_0}^t X(t - \tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau\right|^2 \leq 3\max(a^2, b^2) E|y(t_0)|^2 + \\ &+ 3E\left(\int_{t_0}^t \sqrt{\|X(t - \tau)\|} \beta(\tau) \sqrt{\|X(t - \tau)\|} \beta(\tau) |y(\tau)| d\tau\right)^2 + \\ &+ 3\int_{t_0}^t E\|X(t - \tau) \sigma(\tau, y(\tau))\|^2 d\tau \leq 3\max(a^2, b^2) \times \\ &\times \left(E|y(t_0)|^2 + \int_{t_0}^{\infty} \beta(\tau) d\tau \int_{t_0}^{\infty} \beta(\tau) E|y(\tau)|^2 d\tau + \int_{t_0}^{\infty} \delta^2(\tau) E|y(\tau)|^2 d\tau\right). \end{aligned}$$

Звідки, враховуючи нерівність Гронуолла-Беллмана, отримуємо

$$E|y(t)|^2 \leq \tilde{K} E|y(t_0)|^2, \quad (8)$$

де $\tilde{K} = 3\max(a^2, b^2) e^{3\max(a^2, b^2) K_1(K_1 + 1)}$.

З (8) випливає, що інтеграли

$$\int_{t_0}^{\infty} X_2(t_0 - \tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau, \quad \int_{t_0}^{\infty} X_2(t_0 - \tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau$$

збіжні в сенсі середнього квадратичного.

III) Для відповідних розв'язків $x(t)$ та $y(t)$ оцінимо математичне сподівання норми різниці. Очевидно, що $x(t) = X(t - t_0)x(t_0)$, де $x(t_0)$ визначається формулою (7). Тоді з формули (6) маємо

$$E|x(t) - y(t)|^2 \leq 4E \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau \right|^2 + 4E \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right|^2 + 4E \left| \int_t^\infty X_2(t-\tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau \right|^2 + 4E \left| \int_t^\infty X_2(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right|^2. \quad (9)$$

Оцінимо кожен з доданків правої частини нерівності (9), враховуючи оцінку (8).

$$\begin{aligned} E \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau \right|^2 &\leq E \left(\int_{t_0}^t \|X_1(t-\tau)\| \beta(\tau) |y(\tau)| d\tau \right)^2 = \\ &= E \left(\int_{t_0}^t \sqrt{\|X_1(t-\tau)\| \beta(\tau)} \sqrt{\|X_1(t-\tau)\| \beta(\tau)} |y(\tau)| d\tau \right)^2 \leq \\ &\leq \tilde{K} E |y(t_0)|^2 \left(\int_{t_0}^t \|X_1(t-\tau)\| \beta(\tau) d\tau \right)^2 \leq \tilde{K} E |y(t_0)|^2 \left(\int_{t_0}^t a e^{-a(t-\tau)} \beta(\tau) d\tau \right)^2. \end{aligned}$$

Оскільки $\beta(t)$ абсолютно інтегрована на $t \geq 2t_0$, то легко отримати оцінку

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t e^{-a(t-\tau)} \beta(\tau) d\tau &= \int_{t_0}^{t/2} e^{-a(t-\tau)} \beta(\tau) d\tau + \int_{t/2}^t e^{-a(t-\tau)} \beta(\tau) d\tau \leq \\ &\leq e^{-\frac{at}{2}} \int_{t_0}^{t/2} \beta(\tau) d\tau + \int_{t/2}^t \beta(\tau) d\tau \leq e^{-\frac{at}{2}} \int_0^\infty \beta(\tau) d\tau + \int_{t/2}^t \beta(\tau) d\tau \rightarrow 0, t \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Враховуючи властивість стохастичного інтегралу Вінера-Іто, отримаємо оцінку для другого доданку (9).

$$E \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right|^2 \leq \tilde{K} E |y(t_0)|^2 \int_{t_0}^t a^2 e^{-2a(t-\tau)} \delta^2(\tau) d\tau.$$

Далі, враховуючи інтегровність $\delta^2(\tau)$, аналогічно вище приведений оцінці першого доданку (9), можна одержати, що останній вираз прямує до нуля при $t \rightarrow \infty$.

Аналогічно проведенням вище викладкам, можна показати збіжність до нуля третього та четвертого доданків співвідношення (9).

Таким чином,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} E|x(t) - y(t)|^2 = 0.$$

Теорему 1 доведено.

3. Асимптотична еквівалентність з ймовірністю 1.

Теорема 2. За умов теореми 1, система (2) асимптотично еквівалентна системі (1) з ймовірністю 1.

• *Доведення.*

Початок доведення даної теореми повністю повторює пункти I), II) доведення теореми 1.

III) Подальше доведення базується на оцінках отриманих з використанням властивостей стохастичних інтегралів.

Виберемо послідовності $\{n_k | k \geq 1\}$ і $\{m_k | k \geq 1\}$, так, щоб $n_k \geq k$ та $m_k \geq k$, $k \geq 1$, і виконувались нерівності

$$\int_{n_k}^{\infty} \beta(\tau) d\tau \leq \frac{1}{2^k}, \quad \int_{m_k}^{\infty} \delta'(\tau) d\tau \leq \frac{1}{2^k}, \quad k \geq 1.$$

По послідовностях $\{n_k\}$ та $\{m_k\}$ побудуємо послідовність $\{l_k | k \geq 1\}$, таку, що $l_k = 2 \max\{n_k, m_k\}$, $k \geq 1$.

Так як, очевидно, $x(t) = X(t-t_0)x(t_0)$, де $x(t_0)$ визначається формулою (7), то з формули (6) для відповідних розв'язків $x(t)$ та $y(t)$ для послідовності $1/k$ отримаємо

$$\begin{aligned} & P \left\{ \sup_{t \geq l_k} |x(t) - y(t)| \geq 1/k \right\} = \\ & = P \left\{ \sup_{t \geq l_k} \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau + \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau - \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \int_t^\infty X_2(t-\tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau - \int_t^\infty X_2(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| \geq 1/k \right\} \leq \quad (10) \\ & \leq P \left\{ \sup_{t \geq l_k} \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau \right| \geq \frac{1}{4k} \right\} + P \left\{ \sup_{t \geq l_k} \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| \geq \frac{1}{4k} \right\} \\ & + P \left\{ \sup_{t \geq l_k} \left| \int_t^\infty X_2(t-\tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau \right| \geq \frac{1}{4k} \right\} + P \left\{ \sup_{t \geq l_k} \left| \int_t^\infty X_2(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| \geq \frac{1}{4k} \right\}. \end{aligned}$$

Далі оцінимо кожен з доданків останньої нерівності. Використовуючи нерівність Чебишова для додатної випадкової величини, отримаємо

$$\begin{aligned} & P \left\{ \sup_{t \geq l_k} \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau \right| \geq \frac{1}{4k} \right\} \leq 4kE \sup_{t \geq l_k} \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau \right| \leq \\ & \leq 4kE \sup_{t \geq l_k} \int_{t_0}^t \|X_1(t-\tau)\| \beta(\tau) |y(\tau)| d\tau \leq \\ & = 4ka\sqrt{\tilde{K}E} |y(t_0)|^2 \sup_{t \geq l_k} \left(\int_{t_0}^{m_2} e^{-a(t-\tau)} \beta(\tau) d\tau + \int_{m_2}^t e^{-a(t-\tau)} \beta(\tau) d\tau \right) \leq \\ & \leq 4ka\sqrt{\tilde{K}E} |y(t_0)|^2 \left(e^{-\frac{a l_k}{2}} \int_{t_0}^{\infty} \beta(\tau) d\tau + \int_{l_k/2}^{\infty} \beta(\tau) d\tau \right) \leq \\ & \leq 4ka\sqrt{\tilde{K}E} |y(t_0)|^2 \left(e^{-\frac{a k}{2}} K_1 + \frac{1}{2^k} \right) =: I_k^{(1)}. \end{aligned}$$

Проведемо оцінку другого доданку нерівності (10). Очевидно, що для довільного додатного $N' \geq l_k$

$$\begin{aligned} & \sup_{l_k \leq t \leq N'} \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| \leq \\ & \leq \sup_{l_k \leq t \leq N'} \left| \int_{t_0}^{l_k} X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| + \sup_{l_k \leq t \leq N'} \left| \int_{l_k}^t X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right|. \end{aligned}$$

Таким чином, маємо

$$\begin{aligned} & P \left\{ \sup_{l_k \leq t \leq N'} \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| \geq \frac{1}{4k} \right\} \leq \\ & \leq P \left\{ \sup_{l_k \leq t \leq N'} \left| \int_{t_0}^{l_k} X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| \geq \frac{1}{8k} \right\} + \\ & + P \left\{ \sup_{l_k \leq t \leq N'} \left| \int_{l_k}^t X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| \geq \frac{1}{8k} \right\}. \end{aligned} \quad (11)$$

Оцінимо перший доданок правої частини нерівності (11)

$$\begin{aligned} & P \left\{ \sup_{l_k \leq t \leq N'} \left| \int_{t_0}^{l_k} X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| \geq \frac{1}{8k} \right\} \leq \\ & \leq 64k^2 \sup_{l_k \leq t \leq N'} \int_{t_0}^{l_k} \|X_1(t-\tau)\|^2 \delta^2(\tau) E |y(\tau)|^2 d\tau \leq \\ & \leq 64k^2 \tilde{K} E |y(t_0)|^2 e^{2\alpha l_k} \int_{t_0}^{l_k} e^{2\alpha\tau} \delta^2(\tau) d\tau \leq \\ & \leq 64k^2 \tilde{K} E |y(t_0)|^2 \left(e^{-\alpha l_k} \int_{t_0}^{l_k/2} \delta^2(\tau) d\tau + \int_{l_k/2}^{l_k} \delta^2(\tau) d\tau \right) \leq \\ & \leq 64k^2 \tilde{K} E |y(t_0)|^2 \left(e^{-\alpha l_k} K_1 + \frac{1}{2^k} \right) =: I_k^{(2)}. \end{aligned}$$

Проводячи викладки аналогічні попереднім, можемо показати справедливості оцінки

$$P \left\{ \sup_{l_k \leq t \leq N'} \left| \int_{l_k}^t X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| \geq \frac{1}{8k} \right\} \leq 64k^2 \tilde{K} E |y(t_0)|^2 \frac{1}{2^k} =: I_k^{(3)}.$$

Спрямувавши $N' \rightarrow \infty$ та, враховуючи неперервність імовірнісної міри $P\{\cdot\}$, матимемо

$$P \left\{ \sup_{t \geq l_k} \left| \int_{t_0}^t X_1(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| \geq \frac{1}{4k} \right\} \leq I_k^{(2)} + I_k^{(3)}.$$

Оцінюючи третій та четвертий доданки правої частини нерівності (10) отримуємо

$$P\left\{\sup_{t \geq t_k} \left| \int_t^\infty X_2(t-\tau) f(\tau, y(\tau)) d\tau \right| \geq \frac{1}{4k} \right\} \leq \frac{4bk\sqrt{\tilde{K}E} |y(t_0)|^2}{2^k} =: I_k^{(4)},$$

$$P\left\{\sup_{t \geq t_k} \left| \int_t^\infty X_2(t-\tau) \sigma(\tau, y(\tau)) dW_\tau \right| \geq \frac{1}{4k} \right\} \leq \frac{16b^2k^2\tilde{K}E |y(t_0)|^2}{2^k} =: I_k^{(5)}.$$

Отже маємо

$$P\left\{\sup_{t \geq t_k} |x(t) - y(t)| \geq \frac{1}{k} \right\} \leq \sum_{i=1}^5 I_k^{(i)} =: I_k.$$

Очевидно, що ряд $\sum_{k=1}^{\infty} I_k$ збіжний, а значить, з леми Бореллі-Кантеллі отримуємо, що існує додатна ціла випадкова величина $M = M(\omega)$, така що $\forall k \geq M(\omega)$ виконується

$$\sup_{t \geq t_k} |x(t) - y(t)| < 1/k \text{ з ймовірністю } 1. \quad (12)$$

Таким чином, для майже всіх ω , для довільного $\varepsilon > 0$, існує $T = T(\varepsilon, \omega) = t_{k_0}$, де $k_0 = \max\{[1/\varepsilon] + 1, M(\omega)\}$, що для всіх $t \geq T$ виконується

$$|x(t) - y(t)| \leq \sup_{t \geq T} |x(t) - y(t)| < 1/k_0 \leq \varepsilon.$$

Звідки й слідує твердження теореми 2.

Література

1. Царьков Е.Ф. Случайные возмущения функционально дифференциальных уравнений. – Рига: Зинатне, 1989. – 421 с.
2. Хасьминский Р.З. Устойчивость систем дифференциальных уравнений при случайных возмущениях их параметров. – М.: Наука, 1969. – 368 с.
3. Ясинский В.К. Стохастические дифференциально-функциональные уравнения со всей предысторией. – Киев: Издательство "ТВиМС", 2003. – 254 с.
4. Демидович Б.П. Лекции по математической теории устойчивости. – М.: Наука, 1967. – 472 с.
5. Кулініч Г.Л. Асимптотичний аналіз нестійких розв'язків одновимірних стохастичних рівнянь. Навч. пос. – К.: «Київський університет», 2003. – 55 с.
6. Buldygin V.V., Klesov O.L., Steinebach J.G. PRV property and the asymptotic behavior of solution of stochastic differential equations. In: Mat. НАН України. Міжн. конф. «Сучасні проблеми і нові напрямки теорії ймовірностей» Мат. конф. – Чернівці, 2005
7. Гихман И.И., Скороход А.В. Стохастические дифференциальные уравнения. – Киев: Наукова думка, 1968. – 354 с.

Надійшла до редакції 17 січня 2006

УДК 531.384

Віктор П.Легеза*, Василь
О.Пятецький

**Про диференціальне рівняння
напрямної лінії найшвидшого
спуску важкого однорідного
циліндра**

В загальній формі визначено диференціальне рівняння лінії найшвидшого спуску важкого однорідного циліндра. Рух циліндра розглядався як кочення вздовж шуканої кривої без ковзання. Отримано функціонал у вигляді сумарного часу руху циліндра та розв'язано відповідну варіаційну задачу по мінімізації цього функціоналу.

Ключові слова: важкий однорідний циліндр, кочення без ковзання, найшвидший спуск, мінімізація функціоналу.

Viktor P.Legeza*, Vasyl O.Piatetsky

**On differential equation of
directive line of the fastest descent
of the heavy homogeneous
cylinder**

Differential equation of a line of the fastest descent of the heavy homogeneous cylinder has been defined in the common form. A motion of the cylinder has been considered as a rolling along a searching curve without sliding. The functional has been obtained as a total time of the motion of the cylinder and corresponding variational problem of the minimization of this functional has been solved.

Key Words: heavy homogeneous cylinder, rolling without sliding, fastest descent, minimization of functional.

*E-mail: Viktor_Legeza@ukr.net

Вступ. Для значної кількості віброзахисних систем критерієм ефективності їх функціонування є мінімум переміщень деяких точок несучого об'єкту або мінімум зусиль в небезпечних перерізах, які виникають під час його вимушених коливань [1-3]. Але існує ряд віброзахисних пристроїв, для яких головним критерієм ефективності їх функціонування є мінімізація часу, за який вдається зменшити рівень амплітуд вимушених коливань несучих об'єктів до прийнятного [4-8]. В роботі такий критерій використовується для віброзахисних пристроїв коткового типу [9]. В зв'язку з цим виникла задача про визначення диференціального рівняння лінії найшвидшого спуску важкого циліндра, що котиться по ній без ковзання.

Отже, в статті розглядається динамічна задача про плоскопаралельний рух важкого однорідного циліндра по циліндричній виїмці, пряма крива якої забезпечує його найшвидший спуск. Ця робота є узагальненням відомої роботи І.Бернуллі про брахістохрону [10,11], в якій було знайдено рівняння кривої, що забезпечує найшвидший спуск по ній матеріальної точки. Як відомо, ця крива представляє собою циклоїду.

Постановка задачі та побудова цільового функціонала. Нехай однорідний циліндр з масою m та з радіусом r перекочується без ковзання по деякій циліндричній виїмці з напрямною кривою AKL (рис.), яка лежить у вертикальній площині, та починає свій рух з точки A без початкової швидкості. Знайдемо час, який витрачається при переміщенні циліндра з точки A в точку K . Виберемо початок координат у точці A , вісь AZ направимо вертикально вниз, вісь AX - горизонтально вправо.

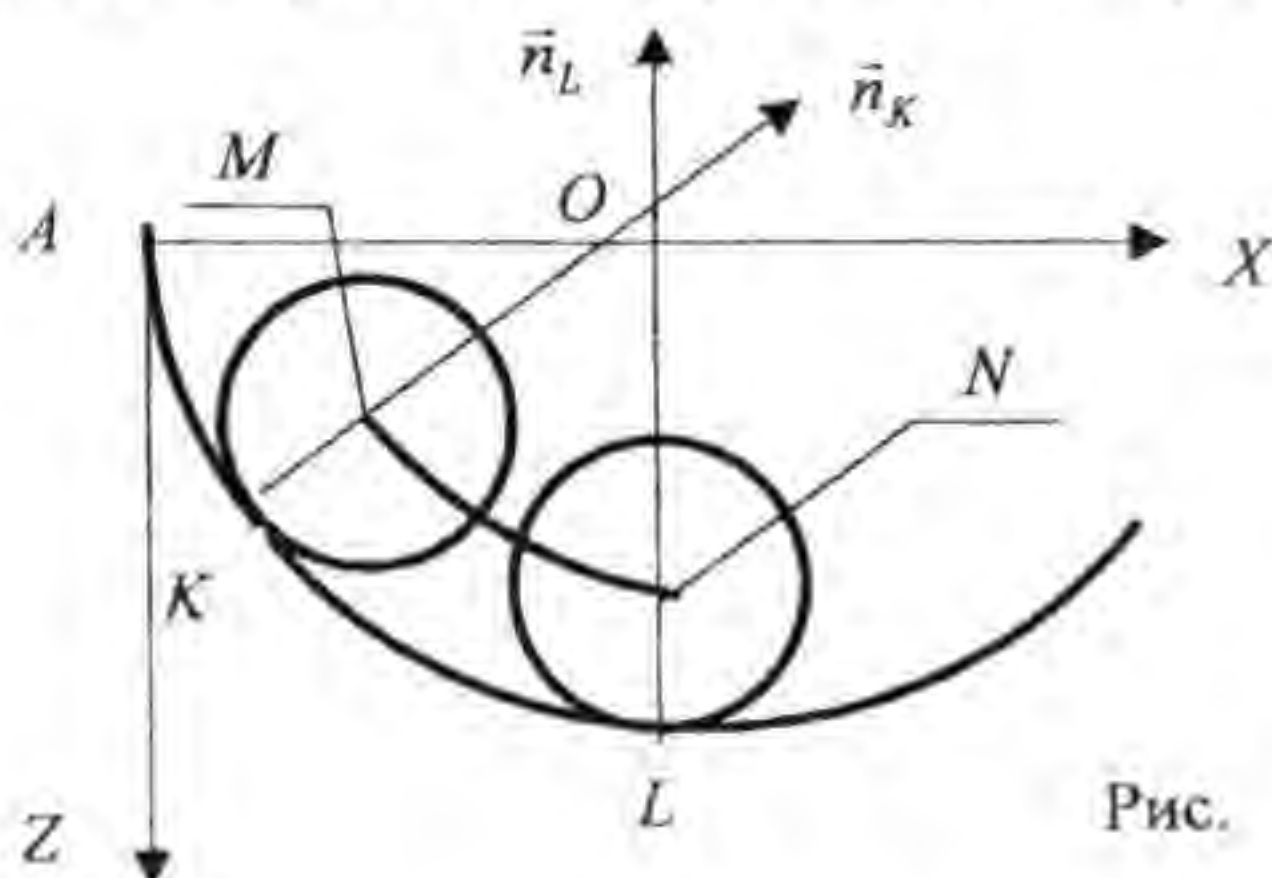


Рис.

Запишемо вираз для вектора одиничної внутрішньої нормалі, проведеної до шуканої кривої в довільній її точці. Він має такий вигляд:

$$\vec{n} = \left(\frac{z'}{\sqrt{1+(z')^2}}; 0; -\frac{1}{\sqrt{1+(z')^2}} \right)^T \quad (1)$$

де $z = z(x)$ - рівняння шуканої кривої AKL ; $z' = \frac{dz}{dx}$.

Тоді потенційна енергія циліндра дорівнює:

$$V = -mg \left(z - \frac{r}{\sqrt{1+(z')^2}} \right) + const, \quad (2)$$

де $r = KM = LN$ - радіус циліндра.

Інтеграл енергії для даної задачі має вигляд:

$$\frac{mv^2}{2} + \frac{J\dot{\phi}^2}{2} = mg \left(z - \frac{r}{\sqrt{1+(z')^2}} \right) + z_0, \quad (3)$$

де $J = \frac{mr^2}{2}$ - момент інерції однорідного циліндра відносно його центра мас;

$v = r\dot{\phi}$ - швидкість центра мас циліндра, записана через його кутову швидкість $\dot{\phi}$ при відсутності ковзання.

Так як відповідно до прийнятих початкових умов руху при $z = 0$ швидкість центра мас циліндра дорівнює $v = 0$, то стала $z_0 = 0$, і ми отримуємо:

$$\frac{3m(r\dot{\varphi})^2}{4} = mg \left(z - \frac{r}{\sqrt{1+(z')^2}} \right) \quad (4)$$

Для диференціала дуги ds кривої KL маємо:

$$ds = \sqrt{(dx)^2 + (dz)^2} = \sqrt{1+(z')^2} dx \quad (5)$$

Знайдемо вираз для диференціала дуги MN , використовуючи співвідношення (5) для ds . Спочатку запишемо вираз для радіуса кривини $\rho = KO$ у точці K кривої:

$$\rho = \frac{[1+(z')^2]^{3/2}}{|z''|} \quad (6)$$

Вважаючи дуги MN та KL малими ($KO = LO = \rho$), для трикутників OMN та OKL запишемо співвідношення їх подібності:

$$\frac{MN}{MO} = \frac{KL}{KO} \Rightarrow MN = \frac{KL \cdot MO}{\rho} = \frac{ds \cdot (\rho - r)}{\rho} = \frac{[1+(z')^2]^{3/2} - r|z''|}{1+(z')^2} dx \quad (7)$$

Позначимо $d\tilde{s} = MN$. Так як $d\tilde{s} = vdt$, то з цього рівняння можна виразити диференціал часу dt ($\dot{\varphi} = \frac{v}{r}$). Вважаємо, що знак у другій похідній z'' додатній, тобто шукана крива вгнута на досліджуваному інтервалі.

$$dt = \frac{d\tilde{s}}{v} = \frac{d\tilde{s}}{r\dot{\varphi}} = \frac{\sqrt{1+(z')^2} - rz''}{[1+(z')^2] \sqrt{\frac{4g}{3} \left(z - \frac{r}{\sqrt{1+(z')^2}} \right)}} dx \quad (8)$$

Час, за який циліндр перекотиться по кривій з точки A в точку K , дорівнює:

$$T = \int_0^{x_K} \frac{\sqrt{1+(z')^2} - rz''}{[1+(z')^2] \sqrt{\frac{4g}{3} \left(z - \frac{r}{\sqrt{1+(z')^2}} \right)}} dx \quad (9)$$

Отже, час T залежить від виду функції $z = z(x)$, тобто від кривої, по якій перекоцується циліндр без ковзання. Особливістю і відмінністю цієї задачі від попередніх є те, що отримана підінтегральна функція містить як другу похідну z'' шуканої кривої, так і радіус r циліндра, що перекоцується по ній.

Визначення диференціального рівняння лінії найшвидшого спуску важкого циліндра, що котиться по ній без ковзання.

В загальній формі зазначений функціонал має такий вигляд:

$$\Phi(z(x)) = \int_0^x F(x, z, z', z'') dx \quad (10)$$

Розв'яжемо поставлену задачу в загальній формі, не зупиняючись на конкретному вигляді підінтегральної функції, поданої у виразі (9).

Для того, щоб функція $z = z(x)$ доставляла функціоналу $\Phi(z(x))$ мінімум, необхідно, щоб для довільної функції $\tilde{z}(x) = z(x) + \varepsilon \cdot \chi(x)$ (ε - малий параметр), яка є достатньо близькою до $z = z(x)$, значення функціонала $\Phi(\tilde{z}(x))$ було би більшим за $\Phi(z(x))$.

Як відомо, функція $\varepsilon \cdot \chi(x)$, на яку функція $\tilde{z}(x)$ відрізняється від функції $z(x)$, називається варіацією цієї функції, тобто:

$$\tilde{z}(x) - z(x) = \varepsilon \cdot \chi(x) = \delta z \quad (11)$$

Відповідно до цього маємо:

$$\Phi(\tilde{z}(x)) = \int_0^x F(x, z + \delta z, z' + \delta z', z'' + \delta z'') dx \quad (12)$$

Так як величина ε є малою, розкладемо вираз (12) в ряд, обмежуючись членами першого порядку:

$$\begin{aligned} \int_0^x F(x, z + \delta z, z' + \delta z', z'' + \delta z'') dx &= \int_0^x F(x, z, z', z'') dx + \\ &+ \int_0^x \left(\frac{\partial F}{\partial z} \delta z + \frac{\partial F}{\partial z'} \delta z' + \frac{\partial F}{\partial z''} \delta z'' \right) dx + \dots \end{aligned} \quad (13)$$

Із співвідношень (12) та (13) випливає, що останній інтеграл у правій частині виразу (13) представляє собою різницю $\Phi(\tilde{z}(x)) - \Phi(z(x))$ (з точністю до малих вищих порядків). Ця різниця називається першою варіацією функціонала $\Phi(z(x))$, тобто

$$\int_0^x \left(\frac{\partial F}{\partial z} \delta z + \frac{\partial F}{\partial z'} \delta z' + \frac{\partial F}{\partial z''} \delta z'' \right) dx = \delta \int_0^x F(x, z, z', z'') dx = \delta \Phi \quad (14)$$

Перетворимо вираз для $\delta \Phi$ з урахуванням того, що $\delta z = \tilde{z}(x) - z(x)$. Запишемо вирази для варіацій $\delta z'$ та $\delta z''$:

$$\delta z' = \tilde{z}'(x) - z'(x) = \frac{d[\tilde{z}(x) - z(x)]}{dx} = \frac{d(\delta z)}{dx} \quad (15)$$

$$\delta z'' = \tilde{z}''(x) - z''(x) = \frac{d^2(\delta z)}{dx^2} \quad (16)$$

Отже, для варіацій, що розглядаються в досліджуваній задачі, операції варіювання та диференціювання можна переставляти місцями.

Інтегруючи частинами другий доданок у першому інтегралі виразу (14) з урахуванням (15), знайдемо:

$$\int_0^x \frac{\partial F}{\partial z'} \delta z' dx = \int_0^x \frac{\partial F}{\partial z'} \frac{d(\delta z)}{dx} dx = \int_0^x \frac{\partial F}{\partial z'} d(\delta z) = \left[\frac{\partial F}{\partial z'} \delta z \right]_0^x - \int_0^x \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial z'} \right) \delta z dx \quad (17)$$

Так як у точках A та K кривих має місце рівність $\bar{z}(x) = z(x)$, то в цих точках варіації δz дорівнюють нулю. Отже, проінтегрований член у виразі (17) дорівнює нулю. В результаті маємо:

$$\int_0^x \frac{\partial F}{\partial z'} \delta z' dx = - \int_0^x \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial z'} \right) \delta z dx \quad (18)$$

Аналогічно відшукаємо вираз для третього доданка у першому інтегралі формули (14) з урахуванням того, що на кінцях кривих в точках A та K варіації $\delta z'$ дорівнюють нулю. Після двократного інтегрування частинами третього доданка у першому інтегралі формули (14) з використанням співвідношення (16) отримаємо:

$$\int_0^x \frac{\partial F}{\partial z''} \delta z'' dx = \int_0^x \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial F}{\partial z''} \right) \delta z dx \quad (19)$$

Підставимо праві частини виразів (18) та (19) у рівняння (14) та з використанням співвідношення $\delta z = \varepsilon \cdot \chi(x)$ перетворимо його. В результаті маємо:

$$\begin{aligned} \delta \Phi &= \int_0^x \left[\frac{\partial F}{\partial z} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial z'} \right) + \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial F}{\partial z''} \right) \right] \delta z dx = \\ &= \varepsilon \int_0^x \left[\frac{\partial F}{\partial z} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial z'} \right) + \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial F}{\partial z''} \right) \right] \delta \chi(x) dx \end{aligned} \quad (20)$$

Грунтуючись на тих же самих міркуваннях, які використовуються при отриманні необхідних умов існування екстремуму функцій, робимо висновок, що необхідна умова існування екстремуму функціонала $\Phi(z(x))$ полягає у виконанні такої рівності:

$$\delta \Phi \equiv \varepsilon \int_0^x \left[\frac{\partial F}{\partial z} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial z'} \right) + \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial F}{\partial z''} \right) \right] \delta \chi(x) dx = 0 \quad (21)$$

Так як функція $\chi(x)$ вибирається довільно та на кінцях інтервала інтегрування вона дорівнює нулю (через рівність нулю варіацій δz та $\delta z'$ у точках A та K), то рівність (21) перетворюється на таке рівняння:

$$\frac{\partial F}{\partial z} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial z'} \right) + \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial F}{\partial z''} \right) = 0 \quad (22)$$

Отже, для того, щоб функція $z(x)$ забезпечувала екстремум функціонала $\Phi(z(x))$, необхідно, щоб вона задовольняла диференціальне рівняння (22).

Враховуючи конкретний вигляд підінтегральної функції у виразі (9), можна отримати розгорнутий вираз рівняння (22). Через лінійність підінтегральної функції F у виразі (9) відносно другої похідної z'' її можна записати так:

$$F(z, z', z'') = F_1(z, z') + z'' F_2(z, z') \quad (23)$$

Тому всі частинні похідні від F по z'' , починаючи з другого порядку, дорівнюють нулю. Враховуючи вищезазначене, а також незалежність функції F від змінної x , визначимо розгорнутий вираз рівняння (22). Він має такий вигляд

$$\frac{\partial F}{\partial z} - \frac{\partial^2 F}{\partial z' \partial z} z' - \frac{\partial^2 F}{\partial z'^2} z'' - \frac{\partial^2 F}{\partial z' \partial z''} z''' + \frac{\partial^3 F}{\partial z'' \partial z^2} (z')^2 + 2 \frac{\partial^3 F}{\partial z'' \partial z' \partial z} z' z'' + \frac{\partial^3 F}{\partial z'' \partial z'^2} (z'')^2 = 0 \quad (24)$$

Рівняння (24), вперше отримане в цій роботі, представляє собою нелінійне диференціальне рівняння третього порядку відносно невідомої функції $z(x)$ в загальній формі. В це рівняння потрібно підставити підінтегральну функцію із функціонала (9), яка для досліджуваної задачі має такий вигляд:

$$F(z, z', z'') = \frac{\sqrt{1 + (z')^2} - rz''}{\left[1 + (z')^2 \right] \sqrt{\frac{4g}{3} \left(z - \frac{r}{\sqrt{1 + (z')^2}} \right)}} \quad (25)$$

Остаточний розгорнутий вираз диференціального рівняння (24) можна отримати з урахуванням зазначеної підстановки функції (25) у рівняння (24).

Висновки. З теоретичної точки зору отриманий в цій роботі аналітичний результат у вигляді диференціального рівняння (24) є новим узагальненням виконаних раніше І.Бернуллі та Л.Ейлером розробок в рамках задачі про брахістохрону. Узагальнення полягає у врахуванні розмірів циліндричного тіла кочення, що рухається без ковзання по шуканій напрямній кривій $z(x)$ циліндричної виїмки.

З практичної точки зору рівняння напрямної кривої $z(x)$ повинно забезпечити оптимальне проектування віброзахисних котково-демпфірувальних пристроїв. В розглянутій задачі оптимальність слід розглядати у сенсі мінімізації часу, необхідного для віброподавлення вимушених коливань несучих тіл.

Розробка методів та підходів для розв'язання диференціального рівняння (24) та отримання рівняння напрямної кривої $z(x)$ найшвидшого спуску циліндра представляє окрему теоретичну задачу, яка буде поставлена та розв'язана у подальших дослідженнях.

Результати цієї роботи можуть бути використані спеціалістами в галузі теоретичної механіки, варіаційного числення, динаміки та міцності машин і механізмів тощо.

Література

1. Динамический расчет сооружений на специальные воздействия: Справочник проектировщика (Под ред. Коренева Б.Г., Рабиновича И.М.). – М.: Стройиздат, 1981. – 216 с.
2. Сысоев В.И. Устройства для гашения колебаний / Справочник проектировщика “Динамический расчет зданий и сооружений” (под ред. Коренева Б.Г., Рабиновича И.М.), Раздел № 16. – М.: Стройиздат. – 1984. – С. 264 – 271.
3. Фролов К.В., Фурман А.Ф. Прикладная теория виброзащитных систем. – М.: Машиностроение. – 1980. – 320 с.
4. Вибрации в технике: Справ.: Т.6: Защита от вибрации и ударов. М.: Машиностроение. – 1981. – 456 с.
5. Корнев Б.Г. Динамические гасители колебаний // Тезисы доклада на междунар. Симпозиуме «Виброзащита в строительстве». – Ленинград, 1984. – т.2, С. 7 – 17.
6. Остроумов Б.В. Исследование, разработка и внедрение высотных сооружений с гасителями колебаний // Автореф. д.т.н. – М.: ЗАО «ЦНИИПСК им. Мельникова», 2003. – 48 с.
7. Постнов В.А., Калинин В.О., Ростовцев Д.М. Вибрации корабля. Л.: Судостроение, 1983. – 248 с.
8. Шмырев А.Н., Мореншильдт В.А., Ильина С.Г. Успокоители качки судов. – Л.: Судпромгиз. – 1961. – 516 с.
9. Лезега В.П. Моделі і метод віброзахисту динамічних систем на основі котково-демпфірувальних пристроїв // Автореф. д.т.н. – К.: НТУУ “КПІ”, 2004. – 38 с.
10. Бухгольц Н.Н. Основной курс теоретической механики. Ч.1. – М.: Наука. – 1969. – 468 с.
11. Овчинников П.П., Михайленко В.М. Вища математика. Ч.2. – К.: “Техніка”. – 2004. – 792 с.

Надійшла до редакції 12 січня 2006 року

УДК 514.77

Віктор С. Лісняк

Диференціальна геометрія векторного поля

Досліджено загальні векторні поля тривимірного евклідового простору. Одержано формули, пов'язуючі фундаментальні об'єкти початкового векторного поля та асоційованого з ним комплексу прямих.

Ключові слова: векторне поле, інваріант, комплекс прямих, лінійчатий многовид, геометричний об'єкт.

Залучення асоційованих лінійчатих многовидів – це зручний спосіб інваріантного геометричного дослідження конкретних векторних полів еволюціонуючого континууму. Його ж алгоритмічним базисом є зв'язки між компонентами фундаментальних геометричних об'єктів заданого векторного поля та асоційованого з ним комплексу прямих. Вони приводять і до конкретних результатів лінійчатої геометрії, поданих у термінах диференціальної геометрії породжуючих комплекси загальних векторних полів.

Дослідження виконане з використанням інваріантного теоретико-групового методу локальних диференціально-геометричних побудов [3].

§ 1. Фундаментальні геометричні об'єкти загального векторного поля

1. Евклідів простір E_3 віднесемо до рухомого ортореперу $Q = (A; R)$ з вершиною (визначуваною радіус-вектором) A та з о.н.б. $R \equiv (e_1, e_2, e_3)$. Індеси $\alpha, \dots = 1, 2$; $a, \dots = 1, 2, 3$. Дериваційні рівняння для Q такі:

$$dA = \omega^i e_i, \quad de_j = \omega_j^k e_k; \quad \omega_s^r = \omega_r^s. \quad (1)$$

У рівняннях структури $D\omega^a = [\omega^s \omega_s^a]$, $D\omega_s^a = [\omega_s^r \omega_r^a]$ простору E_3 літера D є символом зовнішнього диференціювання.

Оберемо у біжучій точці A множину локальних о.н.б. R так, щоб відповідний вектор e поля E у кожному з них мав подання $e = \lambda e_3$, $\lambda > 0$. (3) Тут $\lambda = |e|$ і тому є функція трьох істотних криволінійних координат A . Зокрема, у разі $\lambda = 1$ маємо одиничне векторне поле E – поле орту e .

2. Відносно таким способом взятих допустимих ортореперів Q визначальні диференціальні рівняння векторного поля E запишуться так:

$$\Theta \equiv -\omega_\alpha^3 + a_{\alpha i} \omega^i = 0, \quad D\Theta_\gamma \equiv 0 \pmod{\Theta_\beta}; \quad (4)$$

$$\Lambda \equiv -d\lambda + \lambda_i \omega^i = 0, \quad D\Lambda \equiv 0. \quad (5)$$

Зовнішні продовження цієї системи приводять до цілої низки рівнянь

$$\Theta_{\alpha i} \equiv da_{\alpha i} - a_{\beta i} \omega_\alpha^\beta - a_{\alpha k} \omega_i^k - a_{\alpha ij} \omega^j = 0, \quad (6)$$

Viktor S. Lisnyak

Differential geometrie of vector field

General vector fields of three-dimensional Euclidean space are considering. Connecting fundamental objects of initial vector field and associated it line complex formulas are build.

Key Words: vector field, geometrical object, invariant, line complex, lineal manifold, vector field.

$$\Theta_{\alpha ij} \equiv da_{\alpha ij} - a_{\beta ij} - a_{\alpha kj} \omega_i^k - a_{\alpha ik} \omega_j^k - a_{\alpha j} a_{\beta i} \omega_3^\beta - a_{\alpha ijk} \omega^k = 0, \quad (7)$$

$$\Delta a_{\alpha ijk} \wedge \omega^k \equiv 0 \pmod{\Theta_\beta, \Theta_{\gamma p}, \Theta_{\varepsilon q r}}; \quad (8)$$

$$\Lambda_i \equiv d\lambda_i - \lambda_k \omega_i^k - \lambda_{ij} \omega^j = 0, \quad (9)$$

$$\Lambda_{ij} \equiv d\lambda_{ij} - \lambda_{kj} \omega_i^k - \lambda_{ik} \omega_j^k - \lambda_{ijk} \omega^k \equiv 0, \quad (10)$$

$$\Delta \lambda_{ijk} \wedge \omega^k \equiv 0 \pmod{\Lambda_s, \Lambda_{pq}}. \quad (11)$$

Тут всі компоненти $a_{\alpha ij}$, $a_{\alpha ijk}$, λ_{ij} , λ_{ijk} фундаментальних геометричних об'єктів векторного поля симетричні за всіма їхніми латинськими індексами.

Оскільки репер $Q = (A; R)$ векторного поля канонізується засобами першого диференціального околу, то об'єкт $(a_{\alpha k}, a_{\alpha kl}; \lambda_s, \lambda_{sh})$ – повний.

§ 2. Функціональні інваріанти та їх інтерпретації

1. Функція λ є інваріантом нульового околу поля E . За допомогою рівнянь (6), (9) переконуємося в абсолютній інваріантності полів функцій

$$I_0 = \lambda, \quad I_1 = 2a_{[12]}, \quad I_2 = \delta^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta}, \quad I_3 = 2a_{[1} a_{2]2]}, \quad I_4 = \delta^{\alpha\beta} a_{\alpha 3} a_{\beta 3}, \quad (1)$$

$$I_5 = (a_{12} a_{23} - a_{22} a_{13})^2 + (a_{12} a_{21} - a_{11} a_{23})^2, \quad I_6 = 2\lambda_{[1} a_{2]3]}, \quad I_7 = \delta^{\alpha\beta} \lambda_\alpha \lambda_\beta, \quad I_8 = \lambda_3$$

Усі 9 інваріантів $I_0, \dots, I_8$ є певними функціями трьох координат точки A . Це повна система алгебраїчно (як функцій компонент ф.г.о.-1) незалежних функціональних інваріантів першого диференціального околу поля E .

2. Афінна нормаль поля E визначається точками A й $A + dA$ за умови $de_3 = 0$. Позначимо

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{13} & a_{11} \\ a_{22} & a_{21} \end{vmatrix}, \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}. \quad (2)$$

Тоді вектор $a = \delta^{ij} \Delta_i e_j$ (3) є саме тим із колінеарних афінній нормалі векторів, модуль та орієнтація якого визначені умовою $ae_3 = I_3$. (4)

Надалі вектор a іменуватимемо вектором афінної нормалі. Він надає геометричну інтерпретацію функціональному інваріантові $I_5 = (\bar{a})^2$. (5)

3. Застосуємо ж оператори векторного аналізу до заданого у неголономному супровідному о.н.б. R деякого інваріантного векторного поля $V = v^i e_i$, $dv^i = -v^j \omega_j^i + v_k^i \omega^k$ і до скалярного поля φ з диференціальним рівнянням $d\varphi = \varphi_i \omega^i$. Одержимо робочі формули

$$\text{grad } \varphi = \delta^{ij} \varphi_i e_j, \quad \text{div } v = v_i^j, \quad \text{rot } v = (v_2^3 - v_3^2) e_1 + (v_3^1 - v_1^3) e_2 + (v_1^2 - v_2^1) e_3. \quad (6)$$

Похідна $\partial X / \partial t$ деякого скаляру чи вектору X за довільним параметром t знаходиться з $dX \wedge \omega^1 \wedge \omega^2 \wedge \omega^3 = -(\partial X / \partial t) \omega^1 \wedge \omega^2 \wedge \omega^3 \wedge dt$. (7)

Позначимо: $\tilde{d}$ – оператор повного диференціювання за всіма параметрами Q , локальна площина $\pi \perp e_3$, $\tilde{e}$ – ортогональна проекція $\tilde{e}$ на π .

Поле E породжує поле площин π , у кожній з них діє лінійний оператор T , який ставить у відповідність $\tilde{d}A \in \pi$ вектор $(-\tilde{d}e_3) \in \pi$. Його

матрицею в о.н.б. $R \equiv (e_1, e_2)$ площини $\pi \in T = (a_{\alpha\sigma})$, звідки одержуємо

$$Sp T = a_{11} + a_{22} = \delta^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta}, \quad \det T = 2a_{1[1}a_{2]2].} \quad (8)$$

Внаслідок залежностей (1), (5) – (8) дістаємо обчислювальні формули

$$I_0 = |e|, \quad I_1 = e_3 \cdot \text{rote}_3, \quad I_2 = Sp T, \quad I_3 = \det T, \quad I_4 = (\overline{\text{rote}_3})^2, \quad I_5 = (\overline{a})^2, \\ I_6 = \overline{\text{grad} \lambda} \cdot \overline{\text{rote}_3}, \quad I_7 = (\overline{\text{grad} \lambda})^2, \quad I_8 = e_3 \cdot \text{grad} \lambda. \quad (9)$$

Вони у термінах вектору a , класичного векторного аналізу й оператора T унаочнюють кожний з повної системи інваріантів $I_0, \dots, I_8$.

Окремі з цих конструкцій Г.С. Польща використала для геометризації розподілів Σ точок у (багатовимірному) проективному просторі P_n [5].

Поле e називається безвихровим (градієнтним), якщо $\text{rote} = 0$, і потенціальним за $e \cdot \text{rote} = 0$, що у допустимому R рівнозначне вимозі $I_1 = 0$.

В останньому разі ортогональні траєкторії поля розташовуються у ∞^1 поверхонь, що можна взяти за означення потенціального поля e . При зміщенні точки A по кожній з цих поверхонь виконується умова $\omega^3 = 0$. (10)

Підрахуємо повну K та середню H кривини кожної з поверхонь (10). Відповідно одержимо $K = |a_{(\alpha\beta)}|$ (11), $H = Sp(a_{\alpha\beta})$. (12)

На рівнянні (10) стикаються геометрії поля ортів та неголономна [4,6].

§ 3. Комплекс векторного поля

1. **Комплекс прямих.** Нехай маємо деякий комплекс K прямих [20]. Помістимо вершину A ортореперу Q на промінь комплексу, а орт e_3 спрямуємо вздовж цього променя. Тоді всі 4 форми ω^B, ω_3^A стають головними. Між ними існує єдине співвідношення, якому можна надати такого вигляду, що диференціальні рівняння K вже запишуться як

$$\theta \equiv -\omega^2 + x_i \Omega^i = 0, \quad D\theta \equiv 0(\text{mod } \theta). \quad (1)$$

Тут перепозначено лінійні форми $\Omega^1 \equiv \omega^1, \quad \Omega^2 \equiv \omega_3^1, \quad \Omega^3 \equiv \omega_3^2$.

Продовжуючи систему (1), одержимо

$$\theta_i \equiv -\Delta x_i + x_{ij} \Omega^j = 0, \quad x_{[ij]} = 0, \quad \Delta x_{ij} \wedge \Omega^j \equiv 0(\text{mod } \theta, \theta_p). \quad (2)$$

Тут вжиті вже використовувані мною позначення $\Delta x_1 = dx_1 + (1 + x_1^2)\omega_1^2$,

$$\Delta x_2 = dx_2 + (x_1 x_2 - x_3)\omega_1^2 + x_1 \omega^3, \quad \Delta x_3 = dx_3 + (x_1 x_3 + x_2)\omega_1^2 - \omega^3. \quad (3)$$

Ф.г.о.-1 (x_i) K визначає його кривину k , центр $M = A + t e_3$ (4)

його променя та орт головної нормалі $E = e_1 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi$ (5)

до біжучого променя формулами $k = \frac{x_1 x_3 + x_2}{1 + x_1^2}, \quad t = \frac{x_1 x_2 - x_3}{1 + x_1^2}, \quad \text{tg } \varphi = x_1$. (6)

Формули (4)-(6) визначають інваріантні образи першого диференціального околу K у його 0-орторепері R [4,6,10].

2. З компонент ф.г.о.-2 (x_i, x_{jk}) можна скласти 6 нових алгебраїчно незалежних інваріантів комплексу прямих (де $m = 1 + x_1^2$) – $i_1 = m^{3/2} x_{11}, \dots$

$$m^{7/2}i_6 = m(x_1(x_1x_2 - x_3)x_{13} + m(x_{33} - x_1x_{32}) - x_1(m(x_{32} - x_1x_{22}) + (7) \\ + x_1(x_1x_2 - x_3)x_{12})) + x_1(x_1x_2 - x_3)(m(x_{13} - x_1x_{12}) + x_1(x_1x_2 - x_3)x_{11}).$$

У неістотно дещо інших позначеннях всі вони подані формулами (37) з [10].

Канонізацію R можна здійснити, сумістивши його вершину A з центром M променя, а орт e_1 – з ортом головної нормалі E . Такий канонічний репер називається нормальним тригранником комплексу [20,21].

Очевидно, одиничне векторне поле E своїм нульовим диференціальним околom однозначно визначає комплекс прямих, для якого орторепер Q поля є його супровідним репером нульового порядку. Уточнимо це.

3. Нехай у деякій області D простору E_3 задане стаціонарне (незмінне у часі) векторне поле E . Через кожну точку $A \in D$ проведемо пряму l , паралельну відповідному точці A векторові e поля E . Одержимо (у загальному випадку) ∞^3 прямих – комплекс K векторного поля E .

Знайдемо вирази компонент ф.г.о.-2 (x_r, x_{rs}) комплексу K через компоненти ф.г.о. породжуючого його векторного поля E .

Виключаючи з рівностей (1.4) форму ω^3 і припускаючи $\Delta_1 \neq 0$ маємо

$$\omega^2 = (\Delta_2 / \Delta_1) \omega^1 - (a_{23} / \Delta_1) \omega_3^1 + (a_{13} / \Delta_1) \omega_3^2. \quad (8)$$

Тут вжито позначення (2.2). Припущення $\Delta_1 \neq 0$ викликає невиродженість об'єкту (Δ_α) , тобто невиродженість K в ∞^1 в'язок паралельних прямих.

Зауважимо, що кожний 0-орторепер R поля E у точці A одночасно є допустимим репером променя комплексу, прохожого через A паралельно відповідному векторові e . Тоді ж зіставлення (1) та (8) показує, що компоненти ф.г.о.-1 асоційованого з E комплексу K мають таку будову:

$$x_1 = \Delta_2 / \Delta_1, \quad x_2 = -a_{23} / \Delta_1, \quad x_3 = a_{13} / \Delta_1. \quad (9)$$

Наголосимо, що визначуваний рівностями (9) об'єкт (x_h) комплексу K вже частково канонізований, бо 0-репери поля E у кожному його твірному елементі формують лише ∞^1 , а 0-репери комплексу K утворюють ∞^2 у кожному його промені. Ця обставина не заважає використанню формул (6) та (9) для побудови виключно абсолютних інваріантів комплексу K .

Внесемо рівності (9) до формул (6), а ті – до (4) і до (5). Дістанемо

$$k = (a_{13}\Delta_2 - a_{23}\Delta_1) / (\Delta_1^2 + \Delta_2^2) \quad (10), \quad \operatorname{tg} \varphi = \Delta_2 / \Delta_1, \quad (11)$$

$$M = A - ((a_{13}\Delta_2 - a_{23}\Delta_1) / (\Delta_1^2 + \Delta_2^2)) e_3. \quad (12)$$

Таким чином; за формулами (2.2) і (10)–(12) кривина, центр променя та головна нормаль комплексу K визначаються через компоненти ф.г.о.-1 $(a_{\sigma h})$ породжуючого цей комплекс K заданого одиничного векторного поля E . Надалі (у його лінійчато-геометричних дослідженнях) без будь якої втрати загальності вважатимемо поле E теж одиничним, тобто з $\lambda \equiv 1$.

Виключивши з системи (1.4) форму ω^2 , одержимо

$$\omega^3 = (\Delta_3 / \Delta_1) \omega^1 - (a_{22} / \Delta_1) \omega_3^1 + (a_{12} / \Delta_1) \omega_3^2. \quad (13)$$

Підставимо ж тепер визначувані рівностям (9) функції x_m до правих частин формул (3) і виконаємо необхідні диференціювання. Вийде

$$\begin{aligned}\Delta x_1 &= dx_1 + (1 + x_1^2)\omega_1^2 = (\Delta_1(\Delta_3\omega_2^3 + m_k\omega^k) - \Delta_2(\Delta_3\omega_1^3 + n_k\omega^k))/\Delta_1^2, \\ \Delta x_2 &= dx_2 + (x_1x_2 - x_3)\omega_1^2 = (a_{23}(\Delta_3\omega_1^3 + n_k\omega^k) + \\ &\quad + \Delta_2(\Delta_3\omega_1^3 - a_{22}\omega_1^3 + a_{12}\omega_2^3) - \Delta_1(a_{21}\omega_3^1 + a_{22}\omega_3^2 + a_{23k}\omega^k))/\Delta_1^2, \\ \Delta x_3 &= dx_3 + (x_1x_3 + x_2)\omega_1^2 - \omega^3 = (\Delta_1(a_{11}\omega_3^1 + a_{12}\omega_3^2 + a_{13k}\omega^k) - \\ &\quad - a_{13}(\Delta_3\omega_1^3 + n_k\omega^k) + \Delta_1(-\Delta_3\omega_1^3 + a_{22}\omega_1^3 - a_{12}\omega_2^3))/\Delta_1^2,\end{aligned}\quad (14)$$

де позначено

$$\begin{aligned}m_k &= a_{13}a_{21k} + a_{21}a_{13k} - a_{23}a_{11k} - a_{11}a_{23k}, \\ n_k &= a_{23}a_{12k} + a_{12}a_{23k} - a_{22}a_{13k} - a_{13}a_{22k},\end{aligned}\quad (15)$$

$$\text{тобто похідні} \quad n_k = \Delta_{1k}, \quad m_k = \Delta_{2k}.\quad (16)$$

Внесемо щойно обчислені значення форм Δx_s до першої групи рівнянь (2), виключимо за допомогою рівності (13) форму ω^3 і зіставимо коефіцієнти при базисних формах $\omega^1, \omega_3^1, \omega_3^2$ комплексу K . Дістанемо формули

$$\begin{aligned}\Delta_1^3 x_{11} &= \Delta_1^2(x_1m_2 + m_1) - \Delta_1\Delta_2(x_1n_2 + n_1) + \Delta_1\Delta_3m_3 - \Delta_2\Delta_3n_3, \\ \Delta_1^3 x_{12} &= \Delta_1(\Delta_1x_2m_2 - \Delta_2x_2n_2 + \Delta_2\Delta_3 + a_{22}m_3) - a_{22}\Delta_2n_3, \\ \Delta_1^3 x_{13} &= \Delta_1^2(x_3m_2 - \Delta_3) + \Delta_2a_{12}n_3 - \Delta_1(\Delta_2x_3n_2 + m_3a_{12}), \\ \Delta_1^3 x_{22} &= a_{22}\Delta_1\Delta_2 - \Delta_1^2(a_{21} + x_2a_{232}) - a_{22}\Delta_1a_{233} + a_{23}\Delta_1(x_2n_2 - \Delta_3) + a_{22}a_{23}n_3, \\ \Delta_1^3 x_{23} &= a_{12}\Delta_1a_{233} - a_{12}\Delta_1\Delta_2 + a_{23}x_3\Delta_1n_2 - \Delta_1^2(a_{22} + x_3a_{232}) - a_{12}a_{23}n_3, \\ \Delta_1^3 x_{33} &= \Delta_1^2(2a_{12} + x_3a_{132}) - a_{12}\Delta_1a_{133} - a_{13}x_3\Delta_1n_2 + a_{12}a_{13}n_3.\end{aligned}\quad (17)$$

Вони стосуються другого диференціального околу комплексу K .

Рівності (17) є обчислювальні формули для визначення компонент x_{hk} ф.г.о.-2 (x_m, x_{st}) комплексу K через компоненти $(a_{\alpha h}, a_{\alpha km})$ ф.г.о.-2 породжуючого його одиничного $(\lambda \equiv 1)$ векторного поля E в E_3 .

Нагадаємо, що компоненти їхніх ф.г.о.-1 пов'язані залежностями

$$\begin{aligned}(a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22})x_1 &= a_{13}a_{21} - a_{11}a_{23}, \\ (a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22})x_2 &= -a_{23}, \quad (a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22})x_3 = a_{13},\end{aligned}\quad (18)$$

з яких у припущенні $a_{11}a_{23} - a_{13}a_{22} \neq 0$ й одержані формули (9).

Компоненти і ф.г.о. вищих порядків комплексу K можна подати функціями від компонент ф.г.о. (тих самих порядків) поля E орту e в E_3 .

§ 4. Інші асоційовані з векторним полем лінійчаті многовиди

Комплекс векторного поля інколи може вироджуватися у конгруенцію чи у ∞^1 в'язок паралельних прямих. Тому звернемося і до конгруенцій.

1. Прямолинійна конгруенція. У її 0-репері Q конгруенція S має вихідними рівняннями $\omega^1 = K\omega_1^3 + L\omega_2^3, \quad \omega^2 = M\omega_1^3 + N\omega_2^3. \quad (1)$

Тут 4 функції K, L, M, N – компоненти ф.г.о.-1 конгруенції C прямих.

У першому ж диференціальному околі біжучого променя конгруенції C визначені рівно два її абсолютних функціональних інваріанти a та b , центр $M = A + te_3$ її променя та інваріантний ортогональний відповідно-му променеві орт $e = e_1 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi$. Одержані у [8] формули (10), (11), (16) дають їхні зображення у неканонізованому репері

$$\begin{aligned} a &= (M - L + \sqrt{(L + M)^2 + (N - K)^2})/2, \\ b &= (-M + L + \sqrt{(L + M)^2 + (N - K)^2})/2 \end{aligned} \quad (2)$$

та ще й значення $t = (N + K)/2, \quad \operatorname{tg} 2\varphi = (N - K)/(L + M).$ (3)

Отже, побудована повна система незалежних інваріантів першого диференціального околу конгруенції прямих C у її 0-репері Q .

2. Конгруенція векторного поля. Векторне поле називається лінійчато виродженим, якщо його комплекс вироджується у конгруенцію.

Репери нульового порядку $Q = (A, R)$ лінійчато виродженого поля E належать множині реперів нульового порядку його конгруенції C , а тому зручно встановити зв'язки диференціальних геометрій E та C . З них 14 найістотніших і геометрично найвиразніших фактів наведені у [4, 13]. Серед них центральним результатом є з'ясування рівнозначності інволютивності лінійчато виродженого E та нормальності асоційованої з ним C .

Найважливішими обчислювальними формулами тут виявляються саме

$$Kc^{\alpha\beta} = (-1)^{\alpha+\beta} \delta^{\alpha\mu} \delta^{\beta\nu} a_{\mu\nu}, \quad K = |a_{\lambda\pi}|, \quad (4)$$

як пов'язуючі при $K \neq 0$ компоненти ф.г.о. поля E та його конгруенції C і відповідні записові рівнянь (1) у вигляді $\theta^\alpha \equiv -\omega^\alpha + c^{\alpha\beta} \omega_\beta^3 = 0.$ (5)

3. Асоційовані комплекси головних нормалей та бінормалей. Комплекс прямих K поля E однозначно визначає асоційовані з ним свої нормальний K^1 та бінормальний K^2 комплекси у відповідно першому та другому його диференціальних околах. Ці своєрідно асоційовані з E многовиди теж придатні для лінійчато-геометричного опису E .

§ 5. Скінченні перетворення векторного поля

1. Кожній точці A з області D поставимо у відповідність деяку точку $\tilde{A}$ в E_3 , задану в R як $\tilde{A} = A + T, \quad T = t^i e_i,$ (1) де T – деяке задане в області D векторне поле. Тут $t^i = t^i(u^i, v)$ – функції координат u^i точки A та параметру v , зміни якого індукують допустимі перетворення локального ортореперу R .

У кожній точці $\tilde{A}$ задамо деякий вектор $\tilde{e}$.

Означення. Побудова векторного поля $\tilde{e}$ за заданими векторним полем E називається скінченим перетворенням векторного поля E .

2. Стосовні поля $\tilde{e}$ формули та об'єкти відмічатимемо позначкою $\sim$ зверху. Побудуємо ж для поля $\tilde{e}$ множини його допустимих ортореперів $\tilde{R} = (\tilde{A}, \tilde{e}_i)$ так само, як це зроблено для поля E . Тоді векторне поле $\tilde{e}$ у $\tilde{R}$ матиме наступне подання:

$$\tilde{e} = \tilde{\lambda} \tilde{e}_3. \quad (2)$$

§ 6. Часткові класи скінченних перетворень

Серед скінченних перетворень векторного поля E відзначимо кілька найцікавіших часткових класів з виразним їх геометричним змістом.

1. Якщо $[\tilde{e}_3 d\tilde{A}]|_{[e_3 dA]} = 0$, то орт $\tilde{e}_3$ має напрям вектору $(t_3^i + \delta_3^i)e_i$.

2. Коли ж $\tilde{e}_3 d\tilde{A}|_{e_3 dA=0} = 0$, то вектор $\tilde{e}_3$ колінеарний векторові

$$\begin{vmatrix} t_1^2 & t_1^3 \\ 1+t_2^2 & t_2^3 \end{vmatrix} e_1 + \begin{vmatrix} t_1^3 & 1+t_1^1 \\ t_2^3 & t_2^1 \end{vmatrix} e_2 + \begin{vmatrix} 1+t_1^1 & t_1^2 \\ t_2^1 & 1+t_2^2 \end{vmatrix} e_3. \quad (1)$$

3. Покладемо $t^3=0$, $\tilde{e}_3=e_3$ (2). Тоді точка $\tilde{A}$ прикладення вектору $\tilde{e}$ лежить у відповідній векторові e площині π . Вектори e та $\tilde{e}$ паралельні. Таке перетворення векторного поля назовемо його *площинним зміщенням*.

4. Скінченне перетворення e , при якому $t^\alpha=0$, $\tilde{e}_3=e$, назовемо *векторним зміщенням* векторного поля e . Множина векторних полів e , для яких існує таке скалярне поле t , що їх векторне зміщення є потенціальне поле $\tilde{e}$, істотно залежить від трьох функцій трьох аргументів кожна.

Оскільки ж це широта довільного векторного поля, то звідси здається, що “майже кожне” векторне поле можна одержати належним векторним зміщенням деякого потенціального поля. Насправді ж це не так, бо рівнопотужність двох нескінченних однотипних множин не є їх тотожністю. Це слід враховувати зокрема при безінтегральних зображеннях побудов.

5. Вважатимемо заданим поле e . Відповідний аналіз показує, що функція t , для якої $\tilde{e}$ потенціальне, визначається з довільністю в 1 функцію двох аргументів. Навпаки, якщо задана функція t , то задовільняюче умові потенціальності $\tilde{e}$ поле e визначається зі старшою довільністю в одну функцію трьох аргументів. Доведено, що для “майже кожного” векторного поля e існує таке його площинне зміщення, що поле $\tilde{e}$ потенціальне.

6. Векторні зміщення поля зберігають його комплекс. Інваріанти комплексу поля є інваріантами і самого векторного поля, які зберігаються і при його довільних векторних зміщеннях. У термінах лінійчатої геометрії наявність векторного зміщення потенціальності поля є розшаровуваність довільного комплексу прямих у ∞^1 нормальних конгруенцій [6,11,12].

7. Природно назвати e векторним полем Вейнгартена чи Дарбу, якщо існує таке векторне його зміщення, що ортогональні траєкторії цього $\tilde{e}$ розшаровуються в ∞^1 поверхонь W Вейнгартена чи Дарбу відповідно. Непорожність класу векторних полів Вейнгартена доведена [11,12].

Необхідні теоретичні відомості з загальних питань апарату зовнішнього диференціального рахунку наведені в [1,21,22] у сучасному викладі.

§ 7. Фізико-механічні застосування векторних полів

Приклади таких застосувань наведені зокрема у моїх раніших статтях [4,6,9]. Там досліджені гравітаційні векторні поля та комплекси прямих, кінематичні поля в ідеальній рідині. Наприклад з'ясовано, що довільність

існування миттєвого векторного поля швидкостей баротропного стаціонарного руху ідеальної рідини складає одну функцію трьох аргументів [14]. Досліджено ріманову геометрію поля тензору інерції та триортогональну систему головних векторних полів інерції [15]. Допоміжні відомості – у [2, 22].

Підходи до диференціальної кінематики векторних полів та їх проєктивних аналогів відображені у публікаціях Г.С. Польщі та моїх [5, 16-19].

§ 8. Нестационарні векторні поля

1. Загальні рівняння. Якщо обрати множину локальних о.н.б. R такою, щоб відповідний вектор e нестационарного поля E у кожному з них мав подання $e = \lambda e_3$, $\lambda > 0$ (1), то повна система в інволюції визначальних диференціальних рівнянь поля E набуває вигляду

$$\theta_\alpha \equiv -\omega_\alpha^3 + a_{\alpha i} \omega^i + a_{\alpha 4} dt = 0, \quad D\theta_\alpha \equiv 0 \pmod{\theta_\beta}; \quad (2)$$

$$\Lambda \equiv -d\lambda + \lambda_i \omega^i + \lambda_4 dt = 0, \quad D\Lambda \equiv 0 \pmod{\theta_\mu}. \quad (3)$$

Тут D – символ зовнішнього диференціювання, dt – диференціал часу t , а $\lambda = |e|$ і тому є функція трьох істотних криволінійних координат в E_3 біжучої точки A прикладення вектору e і часу t [7].

2. Диференціальна кінематика векторного поля. За ейлеровим підходом у дослідженні змінного (зокрема і векторного) поля об'єкт $\partial A / \partial t$ є локальна похідна визначуваного рухом суцільного середовища тензорного поля A . Його можна поєднати з методом рухомого реперу і диференціальних форм [16]. Тоді наявність у деякого об'єкту коваріантного індексу 4 – це вже достатня підстава його належності диференціальній кінематиці віднесеного до супровідного о.н.б. R поля E .

Аналогами рухів многовидів простору P_3 можна вважати залежні від t їхні проєктивні перетворення, а твердого тіла – кожний його репер Q .

Якщо W – поле деякого (інваріантно визначуваного змінним полем Σ точок у P_3 – проєктивного аналогу векторного поля) об'єкту, то у символічній рівності $DW = W_H \omega_0^H + W_t dt$ власне кінематичним є об'єкт W_t , тоді як (алгебраїчно однотипний з ним) W_B (хоч і залежний від параметру t) – суто геометричним. Кінематично W_t є ейлерова похідна від W . Поля об'єктів W_t , відповідні різним виборам W , є предметом проєктивно-диференціальної кінематики розподілів (полів) точок Σ у P_3 [5, 19]. Поняття векторного поля допускає численні перенесення й узагальнення. Найважливішим підсумком цього дослідження є формули (3.19) і (4.4).

Література

1. Васильев А.М. Теория дифференциально-геометрических структур. М.: Изд-во МГУ, 1987. – 192 с.
2. Жермен П. Курс механики сплошных сред. – М.: В. шк., 1983. – 400 с.
3. Лаптев Г.Ф. Дифференциальная геометрия погружённых многообразий. – Тр. Моск. мат. о-ва, 1953, т.2, с. 275 – 382.

4. Лісняк В.С. Геометрия векторных полей в движущемся твердом теле. – М., 1975. – 56 с. Деп. в ВИНТИ 20.10.75, № 3228.
5. Лісняк В.С. Дослідження Г.С. Польщі з геометрії однорідних просторів. – 1993. – 22 с. Деп. у ДНТБ України 05.07.93, № 1373.
6. Лісняк В.С. Дослідження з неголономної геометрії. – 1994. – 23 с. Деп. у ДНТБ України 20.07.94, № 1318.
7. Лісняк В.С. Нестационарні векторні поля / Вісник Київськ. ун-ту, серія фіз.-мат. науки, вип. № 1, 2000 р., с. 95-106.
8. Лісняк В.С. Алгебраїчна побудова інваріантів прямолінійної конгруенції / Вісник Київськ. ун-ту, с. фіз.-м. н., вип. № 2, 2001 р., с. 148-158.
9. Лісняк В.С. Диференціальна геометрія конкретних фізико-механічних полів // Вісник Київськ. ун-ту, серія фіз.-матем. науки. Випуск № 4, 2001 р., с. 124 – 129.
10. Лісняк В.С. Метричні інваріанти комплексу прямих / Вісник Київськ. ун-ту, серія фіз.-мат. науки, вип. № 4, 2001 р., с. 130-138.
11. Лісняк В.С. Скінченні перетворення векторних полів / Вісник Київськ. ун-ту, серія фіз.-мат. науки, вип. № 1, 2002 р., с. 107-116.
12. Лісняк В.С. Розшарування лінійчатих многовидів векторного поля // Вісник Київськ. ун-ту, серія фіз.-мат. науки. Вип. 2, 2002 р., с. 123 – 132.
13. Лісняк В.С. Асоційовані класичні лінійчаті многовиди // Вісник Київського ун-ту. Серія: фіз.-матем. науки. Вип. 2, 2003 р., с. 86-95.
14. Лісняк В.С. Кінематичні поля у матеріальному континуумі // Вісник Київського ун-ту. Серія: фіз.-матем. науки. Вип. 4, 2003 р., с. 101-108.
15. Лісняк В.С. Триортогональна система головних векторних полів інерції // Вісник Київськ. ун-ту. Серія: фіз.-мат. науки. Вип. 1, 2004 р., с. 128-135.
16. Лісняк В.С. Диференціальна кінематика векторного поля / International Conference "Dynamical systems modelling and stability investigation". Thesis of conference reports, Kyiv, 2005. – с. 80.
17. Польща Г.С., Лісняк В.С. Кинематические поля в пространстве проективной связности // Прикладные задачи математической физики, КТИП. – К., 1983. – с. 40-49. Деп. в УкрНИИТИ 27 сентября 1983, № 1059.
18. Польща Г.С., Лісняк В.С. Перетворення множин змінних проективних реперів / М-ли VIII Міжнар. н. конф-ї. КП. – Київ, 2000. – с. 350.
19. Польща Г.С., Лісняк В.С. Проективно-диференціальна кінематика розподілів / International Conference "Dynamical systems modelling and stability investigation". Thesis of conference reports, Kyiv, 2005. – с. 212.
20. Фиников С.П. Геометрия комплекса прямых. – Учёные зап. МГПИ им. В.П. Потёмкина, 1940, вып. 1, том I, с. 3 – 16.
21. Фавар Ж., Курс локальной дифференциальной геометрии. – М.: Изд-во иностр. л-ры, 1960. – 560 с.
22. Шутц Б. Геометрические методы математической физики. – М.: Мир, 1984. – 304 с.

Надійшла до редколегії 22 серпня 2005 р.

УДК 539.3

Ірина І. Лоос

Дослідження циліндричної оболонки в магнітному полі

В даній статті запропонована методика розв'язання двовимірної крайової задачі магнітопружності для циліндричної оболонки.

Ключові слова: оболонка, магнітне поле, магнітопружність.

Irina I. Loos

Investigation of a cylindrical shell in a magnetic field

The present paper outlines a method for solving two-dimensional boundary-value problem of magnetoelasticity for cylindrical shell.

Key Words: shell, magnetic field, magnetoelasticity.

Для дослідження міцності пластин та оболонок, що застосовуються як конструктивні елементи, потрібно в першу чергу визначити їх напружено-деформаційний стан. Для цього розроблені спеціальні теоретичні підходи до побудови моделі їх деформування, що базуються на певних гіпотезах і припущеннях [1-5]. Моделі, що описують деформування пластин та оболонок, зводяться до крайових задач для диференціальних рівнянь, для розв'язання яких застосовуються аналітичні та чисельні методи. За результатами розв'язання задач проводиться аналіз напружено-деформованого стану елементів, які розглядаються, що дозволяє вибрати більш раціональні параметри цих елементів.

Розв'язання крайових задач магнітопружності пов'язане з певними труднощами. Це пояснюється тим, що розв'язуюча система, яка описує напружено-деформований стан оболонки є зв'язаною, тобто складається з рівнянь руху та електродинаміки. Також вона є системою диференціальних рівнянь гіперболо-параболічного типу десятого порядку зі змінними коефіцієнтами. Запропонований нижче підхід до чисельного розв'язання базується на послідовному застосуванні схеми Ньюмарка, методу прямих та методу дискретної ортогоналізації.

У векторному вигляді розв'язуюча система магнітопружності оболонок запишеться у вигляді [6]:

$$\frac{\partial \vec{N}}{\partial s} = \vec{F} \left(s, \varphi, t, \vec{N}, \frac{\partial \vec{N}}{\partial t}, \frac{\partial^2 \vec{N}}{\partial t^2}, \frac{\partial \vec{N}}{\partial \varphi}, \frac{\partial^2 \vec{N}}{\partial \varphi^2}, \frac{\partial^3 \vec{N}}{\partial \varphi^3}, \frac{\partial^4 \vec{N}}{\partial \varphi^4}, \frac{\partial^3 \vec{N}}{\partial \varphi \partial t^2}, \frac{\partial^4 \vec{N}}{\partial \varphi^2 \partial t^2} \right),$$

де $\vec{N} = \vec{N} \{ u, v, w, \vartheta_1, N_1, S, \bar{Q}, M_1, e_1, b_1 \}$. Тут u, v, w – переміщення, ϑ_1 – кут повороту нормалі, N_1 – нормальне тангенційне

зусилля, S – зсувне зусилля, $\bar{Q}_1$ – узагальнене поперечне зусилля, M_1 – згинаючий момент, e_2 – напруженість електричного поля, b_2 – індукція магнітного поля.

Застосовуючи схему Ньюмарка [7]:

$$\begin{aligned}\ddot{u}^{i+\Delta} &= \frac{u^{i+\Delta} - u^i}{\gamma(\Delta t)^2} - \frac{1}{\gamma} \left(\frac{\dot{u}^i}{\Delta t} + \ddot{u}^i (0,5 - \gamma) \right); \\ \dot{u}^{i+\Delta} &= \dot{u}^i + 0,5\Delta t(\ddot{u}^{i+\Delta} + \ddot{u}^i),\end{aligned}\tag{1.1}$$

весь інтервал зміни за часом розіб'ємо на окремі малі інтервали і прослідкуємо історію деформування послідовно розв'язуючи задачі на кожному часовому шарі. Тут γ – параметр схеми; верхні індекси вказують на належність величини до відповідного моменту часу, а Δt – крок інтегрування. Відношення кроків різницевої схеми за часом і просторовою координатою обумовлюється критерієм стійкості Куранта, відповідно до якого крок сітки за часом не повинен перевищувати час, на протязі якого збурення, які розповсюджуються з місцевою швидкістю звука, пробігають віддаль, яка дорівнює розміру кроку за просторовою координатою.

Для пониження розмірності двовимірних рівнянь застосуємо метод прямих. Припустимо, що степені змінюваності основних факторів напружено-деформівного стану циліндричної оболонки в окружному напрямку менша, ніж в радіальному. Припустимо також, що коефіцієнти системи розв'язуючих рівнянь і самі розв'язуючі функції достатньо гладкі функції окружної координати. Похідні по окружній координаті замінимо їх скінченно-різницеви аналогами. Для цього відрізок окружної координати поділимо прямими на n полос. На лініях, які являються границями поділу полос, і вибираємо точки скінченно-різницевих аналогів похідних. В результаті двовимірна задача апроксимується лінійною системою звичайних диференціальних рівнянь порядку $10n$ для взаємозв'язаних функцій $\bar{N}^i (i = 1, 2, \dots, n)$. Граничні умови замінюються їх дискретними значеннями на кінцях проведених прямих.

В якості скінченно-різницевих виразів для похідних використаємо центральні різницеві похідні, які мають другий порядок точності. Так, у випадку циліндричної оболонки похідні будь-якої функції f по координаті φ можна апроксимувати такими виразами:

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial \varphi} &= \frac{f^{i+1} - f^{i-1}}{2\lambda}; \\ \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} &= \frac{f^{i+1} - 2f^i + f^{i-1}}{\lambda^2}; \\ \frac{\partial^3 f}{\partial \varphi^3} &= \frac{f^{i+2} - 2f^{i+1} + 2f^{i-1} - f^{i-2}}{2\lambda^3}; \\ \frac{\partial^4 f}{\partial \varphi^4} &= \frac{f^{i+2} - 4f^{i+1} + 6f^i - 4f^{i-1} + f^{i-2}}{\lambda^4};\end{aligned}\tag{1.2}$$

$$\text{де } \lambda = \frac{2\pi}{n}.$$

Після застосування схеми Ньюмарка (1.1), підставляючи замість похідних по окружній координаті центральні різниці (1.2), для моменту часу $t+\Delta t$ отримаємо систему звичайних диференціальних рівнянь у формі Коші. Для чисельного розв'язання цієї системи застосуємо стійкий метод дискретної ортогоналізації.

Розглянемо поведінку алюмінієвої кругової циліндричної оболонки змінної товщини, яка знаходиться в постійному магнітному полі $\vec{B} = (B_{10}, B_{20}, B_{30})$ під дією нормальної складової механічної сили P_z . Нехай лівий кінець оболонки-шарнір, вільний в нормальному напрямку, а правий кінець шарнірно закріплений. В якості граничних умов для електромагнітної групи рівнянь задамо на лівому кінці $b_3 = \pm 0.5 \sin \omega t$, а на правому $b_3 = 0$. Товщина оболонки змінюється за законом $h = h_0(1 + \alpha \cos \varphi)$, де α набуває значень 0.3, 0.5, 0.7.

Параметри оболонки і матеріала виберемо наступні: $l=0.49\text{м}$;
 $h_0 = 5 \cdot 10^{-3}\text{м}$; $r = 0.3\text{м}$; $E = 7.1 \cdot 10^{10}\text{Н/м}^2$; $\nu = 0.34$; (Ом | м) ;
 $\mu = 1.256 \cdot 10^{-6}\text{Гн/м}$; $\omega = 3.1416 \cdot 10^2\text{с}^{-1}$; $\rho = 2670\text{кг/м}^3$; $B_{10} = -0.1\text{Т}$;
 $B_{20} = B_{30} = 5 \cdot 10^{-3}\text{Т}$; $P_z = 2 \cdot 10^3 \sin \varphi\text{ Н/м}^2$, $0 \leq \varphi \leq \pi$.

Граничні умови запишуться у вигляді:

$$u=v=0, \quad Q_1=500\text{Н/м}, \quad M_1=0, \quad b_3 = \pm 0.5 \sin \omega t, \quad \text{при } s=0;$$

$$u=v=w=0, \quad M_1=0, \quad b_3 = 0, \quad \text{при } s=l.$$

при початкових умовах:

$$\tilde{N}(s, \varphi, t)|_{t=0} = 0; \quad \dot{u}(s, \varphi, t)|_{t=0} = \dot{v}(s, \varphi, t)|_{t=0} = \dot{w}(s, \varphi, t)|_{t=0} = 0.$$

При використанні схеми Ньюмарка (1.1) на першому часовому шарі, окрім перших похідних по часу при $t=0$, необхідно знати другі похідні по часу. Вважаючи, що тіло в початковий момент часу знаходиться в абсолютному спокої, приймаємо, що другі похідні по t також рівні нулю. На наступних кроках по часу ці похідні вже відомі і беруться із розв'язку, отриманого на попередньому кроці. Розв'язок задачі відшукувався на

інтервалі часу $\tau = 10^{-2}$ с, крок інтегрування по часу вибирався рівним $\Delta t = 10^{-3}$ с.

В силу симетрії по φ задача розв'язувалась на інтервалі $[0, \pi]$. При побудові розв'язуючої системи в скінченних різницях враховувалась симетрія функцій $u, w, \vartheta_1, N_1, M_1, Q_1, e_2, b_1$ для 1-го та n -го індексів, тобто $f_0 = f_2, f_{-1} = f_3, f_{n+1} = f_{n-1}, f_{n+2} = f_{n-2}$, і антисиметрія для функцій v і S : $f_0 = -f_2, f_{-1} = -f_3, f_{n+1} = -f_{n-1}, f_{n+2} = -f_{n-2}$.

Дана задача обраховувалась для 11 прямих, оскільки при збільшенні кількості прямих точність розв'язку змінюється лише у третьому-четвертому знаці після коми. Відповідно розв'язувалась система 110 порядку.

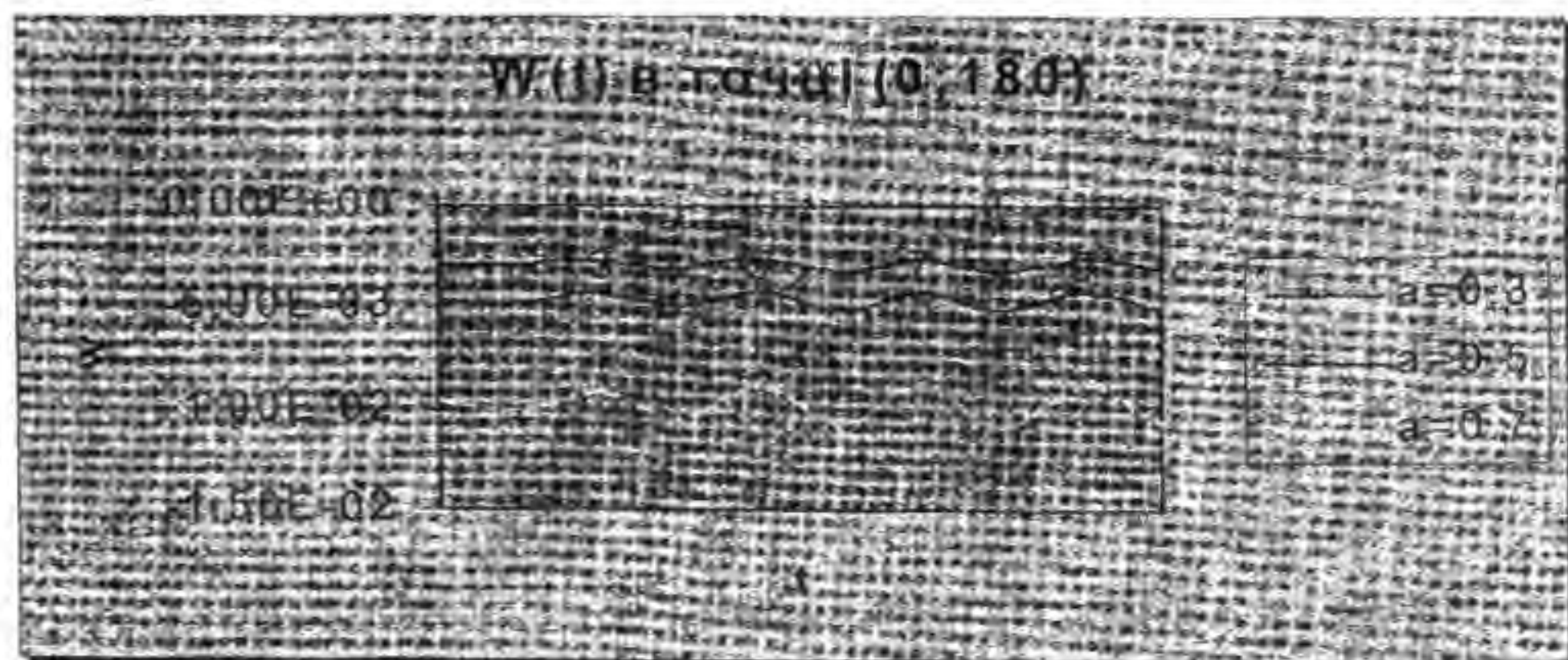


Рис. 1

На рис.1 подані графіки прогину w в залежності від часу на інтервалі $t \in [0; 0.01]$ в точці $s=0, \varphi=180^\circ$, для різних значень параметру $\alpha=0.3; 0.5; 0.7$, який входить в значення товщини нашої оболонки.

Як видно з графіка, в даній точці при збільшенні параметра α товщина облонки зменшується, що викликає збільшення прогину.



Рис. 2

На рис.2 показано розподіл $b_3(t)$, $t \in [0; 0,01]$ при $s=0$, $\varphi=180^\circ$. Оболонка зазнає дії зовнішнього магнітного поля. Криві на рис.2 по формі відтворюють задані граничні умови магнітної індукції. Розподіл магнітної індукції оболонки відповідно до двох варіантів симетричний відносно осі t , і на правому кінці набуває нульових значень.

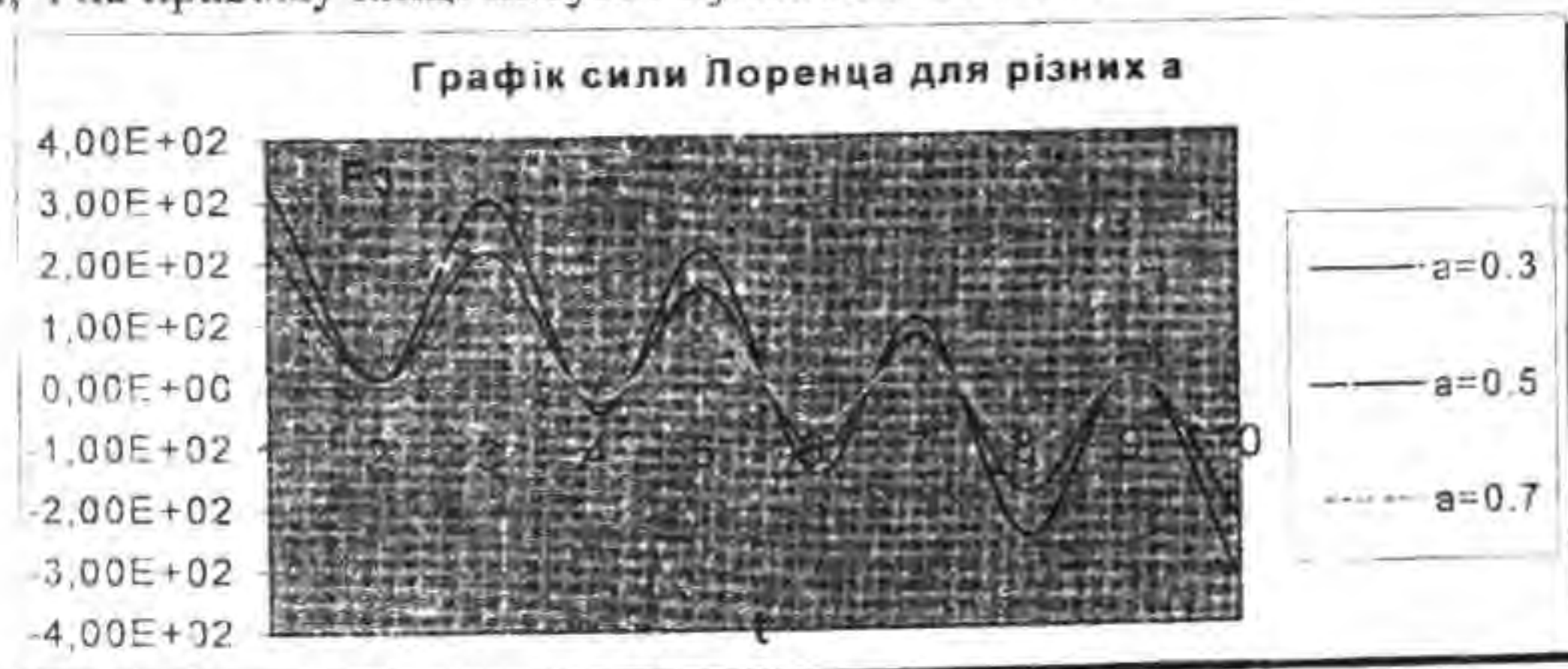


Рис. 3

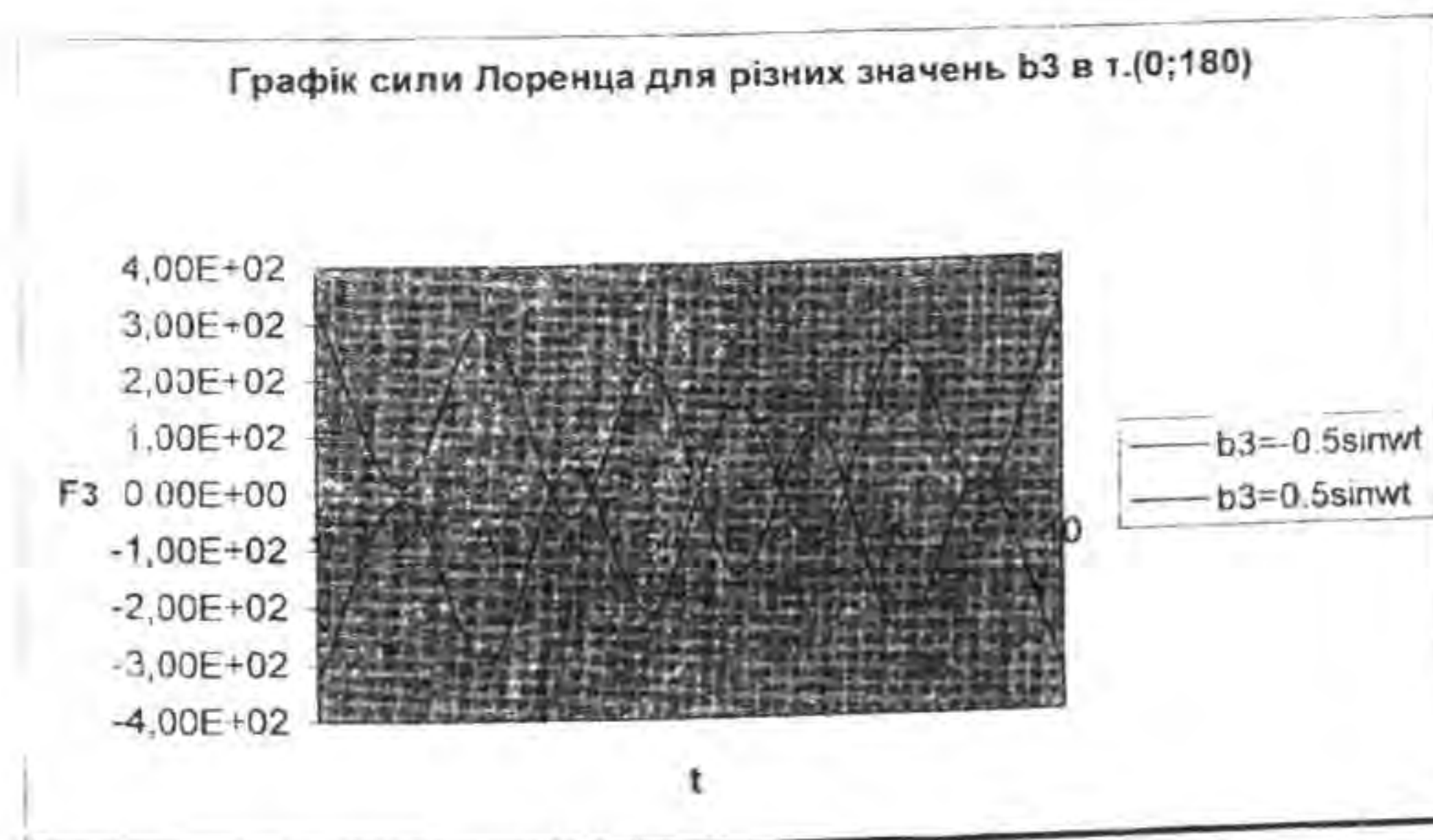


Рис. 4

На рис.3 та рис.4 подано графіки нормальної складової пондеромоторної сили Лоренца F_3 у точці з координатами $(0; 180^\circ)$. Графіки подані при різних значеннях параметру a , який входить в значення товщини нашої оболонки, та при різному розподілі магнітної індукції оболонки відповідно. З рис.3 видно, що при зменшенні товщини

оболонки сили Лоренца теж зменшується.

Відмітимо, що отримані результати не суперечать механічному та фізичному представленню процесів, які протікають в оболонці при дії на неї механічного та магнітного полів. Отримані залежності вказують на те, що при розв'язанні такого класу задач потрібно використовувати зв'язану систему рівнянь.

Виходячи з вище сказаного, можемо зробити висновок, що запропоновану методику можна використовувати при розв'язанні внутрішньої крайової задачі магнітопружності циліндричної оболонки.

Література

1. Амбарцумян С.А., Багдасарян Г.Е., Белубекян М.В. Магнитоупругость тонких оболочек и пластин. - Москва: Наука, 1977.
2. Улітко А.Т., Мольченко Л.В., Ковальчук В.Ф. Магнітопружність при динамічному навантаженні. - Київ: Либідь, 1994. - 155 с.
3. Седов Л.И. Механика сплошной среды. - Москва: Наука, 1976.
4. Новацкий В. Электромагнитные эффекты в твёрдых телах. - Москва: Мир, 1986.
5. Григоренко Я.М., Мольченко Л.В. Основы теории пластин та оболонок. - Київ: Либідь, 1993.
6. Мольченко Л.В., Лоос І.І. Дослідження напруженого стану циліндричної панелі в нестационарному магнітному полі. // Вісник Київського університету. Математика. Механіка. - 2002.- Вип. 8. - с. 129-134.
7. Newmark N.M. A method of Compputation for Structural Dynamics// J. End. Mech. Div. Proc. ASCE. 1959. Vol. 85, № 7. P.67-97.

Надійшла до редакції 11.11.2005

УДК 517.958:512.816

Олена В. Магда

Про групові властивості
квазілінійних рівнянь
гіперболічного типу

Серія: фізико-математичні науки

В даній роботі розв'язано задачу групової класифікації одного класу квазілінійних рівнянь гіперболічного типу з двома незалежними змінними відносно нерозкладних розв'язних тривимірних алгебр Лі.

Ключові слова. квазілінійні рівняння гіперболічного типу, тривимірних алгебр Лі.

Olena V. Magda

On the group properties of
quasilinear equations of hyperbolic
type

Series: Physics & Mathematics
Sciences

We solve the problem of description of a class of quasilinear equations of hyperbolic type with two independent variables, which are invariant under solvable three-dimensional Lie.

Key Words: quasilinear equations of hyperbolic type, three-dimensional Lie algebras.

*E-mail: magda@imath.kiev.ua

Однією із центральних задач теоретико-групового аналізу диференціальних рівнянь, які містять "довільний елемент" (звичайно це довільна функція одного, або кількох аргументів) є проблема групової класифікації даних рівнянь [1]. Іншими словами, розглядається задача: із даного класу диференціальних рівнянь з частинними похідними вибрати ті, які мають високі симетрійні властивості. Одним із визначних класів рівнянь сучасної математичної фізики є клас диференціальних рівнянь з частинними похідними другого порядку вигляду

$$u_{xx} = F(t, x, u, u_x)u_{xx} + G(t, x, u, u_x). \quad (1)$$

Зокрема, до рівнянь вигляду (1) належить рівняння Ліувілля, sin-Гордона, Д'аламбера, які знайшли широкі застосування в різних моделях реальних

фізичних процесів.

В даній статті розв'язується проблема групової класифікації квазілінійних рівнянь другого порядку виду

$$u_{tt} = u_{xx} + F(t, x, u, u_x), \quad (2)$$

де $u = u(t, x)$, $u_t = \frac{\partial u}{\partial t}$, $u_x = \frac{\partial u}{\partial x}$, $u_{tt} = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$, $u_{xx} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, F — довільна гладка функція своїх аргументів, $F_{u, u_x} \neq 0$, які є підкласом рівнянь (1), відносно нерозкладних розв'язних тривимірних алгебр Лі. Проблема групової класифікації деяких одновимірних нелінійних хвильових рівнянь розглядалась багатьма авторами (див., наприклад, [2]-[6]).

Задача групової класифікації рівнянь з частинними похідними еквівалентна проблемі класифікації реалізації в класі інфінітезимальних операторів алгебр інваріантності цих рівнянь з точністю до еквівалентності, яку визначає група G досліджуваного рівняння.

Рівняння наступного вигляду

$$u_{tt} = u_{xx} - u^{-1} u_x^2 + A(x) u_x + B(x) u \ln |u| + u D(t, x), \quad (3)$$

були повністю прокласифіковані в статті [8]. Крім того в статті [8] одержано вичерпний опис рівнянь вигляду (2), які допускають тривимірні розкладні розв'язні алгебри Лі. Тому в цій статті розв'язується задача групової класифікації рівнянь виду (2), які нееквівалентні рівнянням виду (3) відносно нерозкладних розв'язних тривимірних алгебр Лі. Наведемо деякі результати статті [8], які будуть використовуватись в подальших дослідженнях.

Твердження 1 Групу інваріантності рівняння (2), генерує інфінітезимальний оператор, який має вигляд

$$X = (\lambda t + \lambda_1) \partial_t + (\lambda x + \lambda_2) \partial_x + [h(x)u + r(t, x)] \partial_u. \quad (4)$$

При цьому, дійсні сталі $\lambda, \lambda_1, \lambda_2$ та функції $h = h(x)$, $r = r(t, x)$, $F = F(t, x, u, u_x)$ задовольняють таке рівняння:

$$\begin{aligned} r_{tt} - r_{xx} - \frac{d^2 h}{dx^2} u - 2 \frac{dh}{dx} u_x + (h - 2\lambda) F - \\ - (\lambda t + \lambda_1) F_t - (\lambda x + \lambda_2) F_x - (hu + r) F_u - \\ - \left(r_x + \frac{dh}{dx} u + (h - \lambda) u_x \right) F_u = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Твердження 2 Групу ε рівняння (2) складають перетворення

$$\bar{t} = t + \gamma_1, \quad \bar{x} = \varepsilon \gamma x + \gamma_2, \quad v = \rho(x)u + \theta(t, x), \quad (6)$$

де $\{\gamma, \gamma_1, \gamma_2\} \subset R$, $\gamma \neq 0$, $\varepsilon = \pm 1$, $\rho \neq 0$.

Теорема 1 Існують перетворення (6), які зводять оператор (4) до одного із таких семи операторів:

$$\begin{aligned} Q_1 &= k(t\partial_t + x\partial_x) (k \neq 0); \quad Q_2 = \partial_t + k\partial_x (k > 0); \\ Q_3 &= \partial_x; \quad Q_4 = \partial_t; \quad Q_5 = \partial_t + f(x)u\partial_u (f \neq 0); \\ Q_6 &= f(x)u\partial_u (f \neq 0); \quad Q_7 = f(t, x)\partial_u (f \neq 0). \end{aligned}$$

Теорема 2 В класі операторів (4) не існують реалізації алгебр $so(3)$ та $sl(2, R)$.

Наслідок 1 Серед нелінійних рівнянь вигляду (2) не існують такі, алгебри інваріантності яких є ізоморфними алгебрам Лі з нетривіальним фактором Леві.

Підсумовуючи сказане вище, робимо висновок, що без втрати загальності можна обмежитися розглядом реалізацій розв'язаних алгебр Лі.

Зупинимось більш докладно на виконанні другого кроку алгоритму. В теорії абстрактних алгебр Лі з точністю до ізоморфізму розрізняють сім нерозкладних розв'язних тривимірних алгебр Лі над полем дійсних чисел $A_{3,i} = \langle e_1, e_2, e_3 \rangle$ ($i = 3 \dots 9$) (див., наприклад, [8]). Суттєвою особливістю цих алгебр Лі є те, що вони містять як підалгебру двовимірний абелевий ідеал. Тому для опису реалізації тривимірних алгебр ми можемо використовувати результати, які були отримані під час групової класифікації рівнянь виду (2) відносно алгебри $A_{2,1}$ (див., наприклад, [9]).

Оскільки розширення всіх реалізацій алгебри $A_{2,1}$ до реалізацій нерозкладних розв'язних тривимірних дійсних алгебр Лі проводяться аналогічно, зупинимось, для прикладу, детально на випадковій реалізації:

$A_{2,1}^{10}$.

Випадок реалізації $A_{2,1}^{10}$

Неважко переконатися, що перетворення

$$\bar{t} = \gamma t + \gamma_1, \quad \bar{x} = \varepsilon \gamma x + \gamma_2, \quad v = \rho(x)u + \theta(t, x), \quad (7)$$

де $\gamma, \gamma_1, \gamma_2 \in \mathbb{R}, \gamma \neq 0, \varepsilon = \pm 1, \rho \neq 0$, є перетвореннями еквівалентності для реалізації $A_{2,1}^{10} = \langle \partial_t, f(x)u\partial_u \rangle (f \neq 0)$. Тому, безпосередні обчислення показують, що з точністю до дії перетворень (7), ми можемо, вивчаючи можливості розширення реалізації $A_{2,1}^{10} = \langle e_1, e_2 \rangle$ до реалізації алгебр $A_{3,i} = \langle e_1, e_2 \rangle + \langle e_3 \rangle$, відразу покласти, що оператор e_3 збігається з одним із таких операторів:

- 1) $e_3 = t\partial_t + x\partial_x + r(t, x)\partial_u (r_t \neq 0 \text{ або } r = 0)$;
- 2) $e_3 = \partial_x + r(t, x)\partial_u (r_t \neq 0 \text{ або } r = 0)$;
- 3) $e_3 = r(t, x)\partial_u (r_t \neq 0 \text{ або } r = 1)$.

Нехай $e_1 = \partial_t$, $e_2 = f(x)u\partial_u$, а e_3 збігається з першим із наведених вище операторів. Тоді

$$[e_1, e_3] = \partial_t + r_t \partial_u,$$

$$[e_2, e_3] = -xf' u \partial_u - rf \partial_u.$$

Аналіз комутаційних співвідношень для алгебр $A_{3,i} (i = 3, 4, \dots, 6)$ показує, що розширення реалізації $A_{2,1}^{10}$ є можливим до реалізацій алгебр $A_{3,5}$, коли $r = 0, xf' = -f$, $A_{3,6}$, коли $r = 0, xf' = f$, та $A_{3,7}$, коли $r = 0, xf' = -qf (0 < |q| < 1)$. Отже, даний випадок приводить до таких реалізацій вказаних алгебр:

$$A_{3,5} : e_1 = \partial_t, e_2 = x^{-1}u\partial_u, e_3 = t\partial_t + x\partial_x;$$

$$A_{3,6} : e_1 = \partial_t, e_2 = xu\partial_u, e_3 = t\partial_t + x\partial_x;$$

$$A_{3,7} : e_1 = \partial_t, e_2 = |x|^{-q}u\partial_u, e_3 = t\partial_t + x\partial_x (0 < |q| < 1).$$

Якщо оператор e_3 збігається з другим із наведених вище операторів, то

$$\begin{aligned}[e_1, e_3] &= r_t \partial_u, \\ [e_2, e_3] &= -f' u \partial_u - r f \partial_u,\end{aligned}$$

й аналіз визначальних комутаційних співвідношень для алгебр $A_{3,i} (i = 3, 4, \dots, 6)$ показує, що у цьому випадку розширення реалізації $A_{2,1}^{10}$ до реалізацій вказаних алгебр є неможливим.

До аналогічного результату ми приходимо й тоді, коли оператор $e_3 = r(t, x) \partial_u$ ($r_t \neq 0$ або $r = 1$).

Нехай, тепер, $e_1 = f(x) u \partial_u$, $e_2 = \partial_t$. Якщо $e_3 = t \partial_t + x \partial_x + r(t, x) \partial_u$ ($r_t \neq 0$ або $r = 0$), то із співвідношення комутаційних співвідношень

$$\begin{aligned}[e_1, e_3] &= -(rf + xf' u) \partial_u, \\ [e_2, e_3] &= \partial_t + r_t \partial_u\end{aligned}$$

впливає, що розширення реалізації $A_{2,1}^{10}$ у цьому випадкові є можливим лише до реалізації алгебри $A_{3,5}$:

$$\langle x^{-1} u \partial_u, \partial_t, t \partial_t + x \partial_x \rangle$$

яка, з точністю до позначення базисних операторів, збігається з отриманою вище реалізацією алгебри $A_{3,5}$. Якщо $e_3 = \partial_x + r(t, x) \partial_u$ ($r_t \neq 0$ або $r = 0$), то

$$[e_1, e_3] = -(f' u + r f) \partial_u, [e_2, e_3] = ,$$

і аналіз визначальних комутаційних співвідношень алгебр $A_{3,i} (i = 3, 4, \dots, 9)$ показує, що у цьому випадкові розширення реалізації $A_{2,1}^{10}$ до реалізацій вказаних алгебр є неможливим.

До аналогічного результату приводить і розгляд випадку $e_3 = r(t, x) \partial_u$ ($r_t \neq 0$ або $r = 1$).

Отже, реалізація $A_{2,1}^{10}$ допускає розширення в класі операторів (4) лише до трьох реалізацій тривимірних нерозкладних розв'язних алгебр Лі:

$$\begin{aligned} L^1 &\sim A_{3,5}, \quad L^1 = \langle \partial_t, x^{-1} u \partial_u, t \partial_t + x \partial_x \rangle; \\ L^2 &\sim A_{3,6}, \quad L^2 = \langle \partial_t, x u \partial_u, t \partial_t + x \partial_x \rangle; \\ L^3 &\sim A_{3,7}, \quad L^3 = \langle \partial_t, |x|^{-q} u \partial_u, t \partial_t + x \partial_x \rangle \quad (0 < |q| < 1). \end{aligned}$$

Використання класифікуючого рівняння (5) показало, що усі ці реалізації є алгебрами інваріантності (більше цього, максимальними алгебрами інваріантності) нелінійних рівнянь вигляду (2), які не еквівалентні рівнянням вигляду (3). Їх перелік подано нижче:

$$\begin{aligned} L^1 &: u_{tt} = u_{xx} - u^{-1} u_x^2 - 2x^{-2} u \ln |u| + \\ &\quad x^{-2} u G(\omega), \quad \omega = x u^{-1} u_x + \ln |u|; \\ L^2 &: u_{tt} = u_{xx} - u^{-1} u_x^2 + x^{-2} u G(\omega), \\ &\quad \omega = x u^{-1} u_x - \ln |u|; \\ L^3 &: u_{tt} = u_{xx} - u^{-1} u_x^2 - q(q+1)x^{-2} u \ln |u| + u x^{-2} G(\omega), \\ &\quad \omega = x u^{-1} u_x + q \ln |u| \quad (0 < |q| < 1). \end{aligned}$$

У наведених вище рівняннях функції G є довільними функціями одного аргументу.

Зауважимо, що під час розгляду нелінійних рівнянь, інваріантних відносно нерозкладних тривимірних розв'язних алгебр Лі операторів симетрії, ми отримали ряд рівнянь, максимальними алгебрами інваріантності яких є чотиривимірні розв'язні алгебри Лі. Опис решти нелінійних рівнянь, інваріантних відносно нерозкладних тривимірних розв'язних алгебр Лі проводиться аналогічно.

В даній статті ми наводимо деякі з тих нелінійних рівнянь, максимальними алгебрами інваріантності яких є тривимірні нерозкладні розв'язні алгебри Лі. Ми вказуємо реалізації цих алгебр та значення функцій F у відповідних інваріантних рівняннях.

$A_{3,3}$ — інваріантні рівняння

$$\begin{aligned} A_{3,3}^1 &= \langle u \partial_u, \partial_t + k \partial_x, m \partial_t + k^{-1} x u \partial_u \rangle \quad (k > 0, \quad m \neq 0) \\ F &= -u^{-1} u_x^2 + u G(\omega) \omega = -x = kt + mk^2 u^{-1} u_x; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_{33}^2 &= \langle u\partial_u, \partial_x, m\partial_t + xu\partial_u \rangle \quad (m > 0): \\
 F &= -u^{-1}u_x^2 + uG(\omega), \quad \omega = t - mu^{-1}u_x; \\
 A_{33}^3 &= \left\langle |t|^{\frac{1}{2}}\partial_u, -|t|^{\frac{1}{2}}\ln|t|\partial_u, t\partial_t + x\partial_x + \frac{1}{2}u\partial_u \right\rangle \\
 F &= -\frac{1}{4}t^{-2}u + u_x^3G(\xi, \omega), \quad \xi = tx^{-1}, \quad \omega = x \\
 A_{33}^4 &= \langle \partial_u, -t\partial_u, \partial_t + k\partial_x \rangle \quad (k \geq 0); \\
 F &= G(\eta, u_x), \quad \eta = x - kt.
 \end{aligned}$$

$A_{3,5}$ — інваріантні рівняння

$$\begin{aligned}
 A_{3,5}^1 &= \langle |\eta|^{m-1}\partial_u, \partial_t + k\partial_x, t\partial_t + x\partial_x + mu\partial_u \rangle \quad (k > 0, \quad m \neq 1) \\
 F &= (k^2 - 1)(m - 1)(m - 2)\eta^{-2}u + \eta^{m-2}G(\omega), \\
 \omega &= |\eta|^{-m}[\eta u_x - (m - 1)u], \quad \eta = x - kt; \\
 A_{3,5}^2 &= \langle \partial_t, \partial_x, t\partial_x + x\partial_x \rangle, \\
 F &= u_x^2G(u); \\
 A_{3,5}^3 &= \langle \partial_t, \partial_x, t\partial_t + x\partial_x + mu\partial_u \rangle \quad (m \neq 0): \\
 F &= u|u|^{\frac{2}{1-m}}G(\omega), \quad \omega = u_x|u|^m|u|^{1-m}; \\
 A_{3,5}^4 &= \langle \partial_t, \partial_x, t\partial_t + x\partial_x + \partial_u \rangle: \\
 F &= e^{-2u}G(\omega), \quad \omega = e^u u_x; \\
 A_{3,5}^5 &= \langle \partial_t, x^{-1}u\partial_u, t\partial_t + x\partial_x \rangle: \\
 F &= -u^{-1}u_x^2 - 2x^{-2}u\ln|u| + x^{-2}uG(\omega), \\
 \omega &= xu^{-1}u_x + \ln|u|; \\
 A_{3,5}^6 &= \langle \partial_t + kx^{-1}u\partial_u, e^{kx^{-1}}\partial_u, t\partial_t + x\partial_x + u\partial_u \rangle \quad (k > 0): \\
 F &= kx^{-4}u[kt^2 - 2tx + kx^2] + 2ktx^{-2}u_x + x^{-1}e^{kx^{-1}}G(\omega), \\
 \omega &= e^{kx^{-1}}(u_x + ktx^{-2}u);
 \end{aligned}$$

$$A_{3,5}^7 = \langle \varphi(t) \partial_u, \psi(t) \partial_u, \partial_x + u \partial_u \rangle \quad (\varphi' \psi - \varphi \psi' \neq 0):$$

$$F = \varphi' \varphi'' u + u_x G(t, \omega),$$

$$\omega = e^{-x} u_x, \quad \varphi'' \psi - \varphi \psi'' = 0.$$

$A_{3,6}$ — інваріантні рівняння

$$A_{3,6}^1 = \langle \partial_t + k \partial_x, \eta^{m+1} \partial_u, t \partial_t + x \partial_x + m u \partial_u \rangle \quad (k > 0, \quad m \neq -1)$$

$$F = m(k^2 - 1)(m+1)\eta^{-2}u + \eta^{m-2}G(\omega),$$

$$\omega = |\eta|^{1-m} [u_x - \eta^{-1}(m+1)u], \quad |\eta| = x - kt;$$

$$A_{3,6}^1 = \langle \partial_t + k \partial_x, \eta^{m+1} \partial_u, t \partial_t + x \partial_x + m \partial_u \rangle$$

$$F = m(k^2 - 1)(m+1)\eta^{-2}u + \eta^{m-2}G(\omega),$$

$$\omega = |\eta|^{1-m} [u_x - \eta^{-1}(m+1)u], \quad |\eta| = x - kt;$$

$$A_{3,6}^2 = \langle \partial_t + m x^{-1} u \partial_u, x u \partial_u, t \partial_t + x \partial_x \rangle \quad (m \geq 0):$$

$$F = -u^{-1} u_x^2 - 2m t x^{-3} u + x^{-2} u G(\omega),$$

$$\omega = x u^{-1} u_x - \ln |u| + 2m t x^{-1};$$

$$A_{3,6}^3 = \langle \partial_t + k x^{-1} u \partial_u, e^{kx^{-1}} \partial_u, t \partial_t - u \partial_u \rangle \quad (k > 0):$$

$$F = x^{-4} [k^2 x^2 - 2k t x + k^2 t^2] u + 2k t x^{-2} u_x + x^{-3} e^{kx^{-1}} G(\omega)$$

$$\omega = e^{-kx^{-1}} (x^2 u_x + k t u);$$

$$A_{3,6}^4 = \langle e^{-t} \partial_u, e^t \partial_u, \partial_t + k \partial_x \rangle \quad (k \geq 0):$$

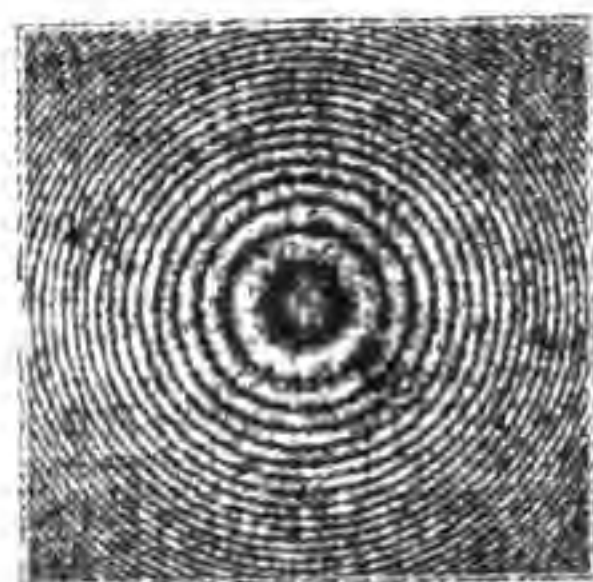
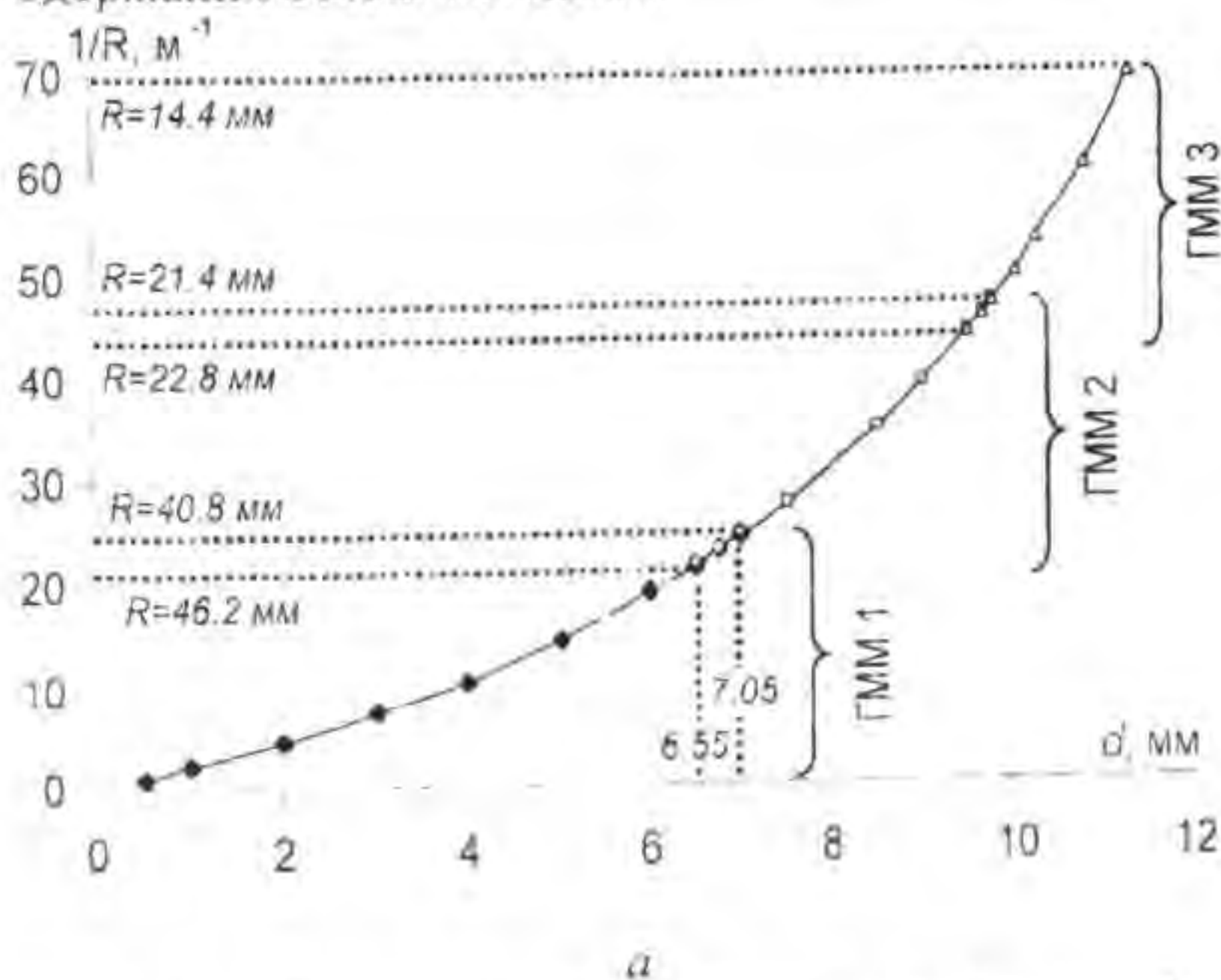
$$F = u + G(\eta, u_x), \quad \eta = x - kt;$$

$$A_{3,6}^5 = \left\langle |t|^{-\frac{1}{2}} \partial_u, |t|^{\frac{3}{2}} \partial_u, t \partial_t + x \partial_x + \frac{1}{2} u \partial_u \right\rangle:$$

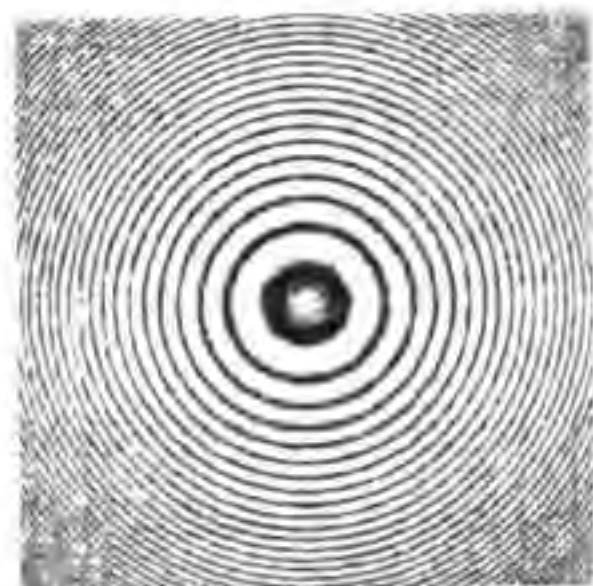
$$F = \frac{3}{4} t^{-2} u + |t|^{-\frac{3}{2}} G(\xi, \omega), \quad \xi = t x^{-1}, \quad \omega = x^{-1} u_x^2$$

$A_{3,7}$ — інваріантні рівняння

Експериментальні результати визначення радіусу кривизни тестового хвильового фронту за допомогою сенсора з матрицею голографічних мікролінз зображені на рис. 3а. Вимірювання проводилося за допомогою трьох послідовно записаних голограм. Перша голографічна матриця мікролінз записувалася за допомогою еталонної плоскої хвилі, що відбивається від дзеркала Д2. З її допомогою вимірювався хвильовий фронт, радіус кривизни якого змінювався від нескінченності до 40.8 мм. Тестові хвильові фронти з радіусами кривизни 46.2 мм та 22.8 мм використовувалися у якості опорних відповідно для запису другої та третьої голографічної матриці мікролінз. Таким чином, вдалося виміряти сферичний хвильовий фронт з радіусом кривизни до 14.4 мм, що неможливо зробити за допомогою рефракційного сенсора з вказаними вище параметрами. Загальний вимірювальний діапазон голографічного сенсора при використанні трьох ітерацій в 2.8 разів перевищував діапазон вимірів звичайного сенсора. Візуальний контроль форми тестового хвильового фронту здійснювався за допомогою інтерферометрії. На рис. 3б показано картину інтерференції еталонної плоскої хвилі та тестової сферичної хвилі з радіусом кривизни 40.8 мм ($d=7.05$ мм). Для порівняння на рис. 3в зображено інтерферограму, розраховану за результатами відновлення цього ж хвильового фронту за допомогою першої голограми. Ідентичність інтерферограм свідчить про тотожність результатів, одержаних обома методами.



б



в

Рис.3. а) Залежність кривизни хвильового фронту від зміщення d дзеркала Д1; б) картина інтерференції плоского пучка з досліджуваною сферичною хвилею ($d = 7.05$ мм), в) синтезована інтерферограма, розрахована за результатами відновлення цього ж хвильового фронту.

Висновки

Таким чином, ми знайшли повний опис рівнянь вигляду (2), інваріантних відносно нерозкладних розв'язних тривимірних алгебр Лі.

Список літератури

1. Овсянников Л.В. Групповой анализ дифференциальных уравнений. — М.: Наука, 1978. — 400с.
2. Pucci E. and Salvatori M.C. Group properties of a class of semilinear hyperbolic equations // *Int. J. Non—Linear Mech.* — 1996. — **21**, №.2. — P.147–152.
3. Pucci E. Group analysis of the equation $u_{tt} + \lambda u_{xx} = g(u, u_x)$ // *Riv. Mat. Univ. Parma* — 1987. — **12**, — №.4. — P.71–87.
4. Ames W.F., Adams E., Lohner R.J. Group properties of $u_{tt} = [f(u)u_x]_x$, // *Int. J. Non—Linear Mech.* — 1981. — **16**, №.5–6. — P.439–447.
5. Oron A., Rosenau Ph. Some symmetries of the nonlinear heat and wave equations // *Phys.Lett.A.* — 1986. — **118**, №4. — P.172–176.
6. Torrisi M., Valenti A. Group properties and invariant solutions for infinitesimal transformations of a nonlinear wave equation // *Int. J. Non—Linear Mech.* — 1985. — **20**, № 3. — P.135–144.
7. Лагно В., Магда О., Жданов Р. Про інваріантність квазілінійних рівнянь гіперболічного типу відносно тривимірних алгебр Лі // *Праці Інституту математики НАН України. Т.36.* — 2001. — С.136–159.
8. Мубаракзянов Г.М. Некоторые теоремы о разрешимых алгебрах Ли // *Изв. Высш. Учебн. Завед.* — 1963. — № 1(32). — С.114–123.
9. Magda O. The group classification of nonlinear wave equations invariant under twodimensional Lie algebras // *Proceeding of Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine.* — 2000. — **30**, Part 1. — P.165–169.

Надійшла до редакції 07.12.05.

УДК 539.3

Віталій В. Островський*,
Андрій Ф. Улітко

**Плоска та осесиметрична задачі
для пружного шару на жорсткій
основі при герцівському наванта-
женні**

*Розглянуто задачу про розподіл
нормальних та дотичних напру-
жень на межі з'єднання пружного
шару з жорстким півпростором.
Розв'язок побудовано для плоского
та осесиметричного випадків при
герцівському навантаженні.*

*Ключові слова: теорія пружно-
сті, епюра Герца, перетворення
Фур'є, перетворення Ханкеля,
розв'язок Папковича-Нейбера*

*E-mail: vitos@univ.kiev.ua

Vitaliy V. Ostrovskiy*,
Andriy F. Ulitko

**Planar and axisymmetric problems
for elastic layer on rigid substrate
under Hertz pressure**

*Problem of distribution of normal
and tangential stresses on the interface
of elastic layer and rigid half-space
have been considered. Solution for
planar and axisymmetric cases with
Hertz pressure has been derived.*

*Keywords: theory of elasticity,
Hertz pressure, Fourier transform,
Hankel transform, Papkovich-Neiber
solution.*

Вступ. В сучасних технологічних операціях широко використовуються різного роду покриття у вигляді тонких пружних шарів або плівок. При роботі з такими покриттями крім проблем технологічних виникають задачі оцінки їх теплових, оптичних, електричних, фрикційних властивостей та поведінки цих характеристик на межі з'єднання покриття з основою. Важливою є задача міцності і надійності з'єднання пружної плівки з основою, яка ґрунтується на розрахунках нормальних та дотичних напружень в місці з'єднання.

В даній статті побудовано точний розв'язок плоскої та осесиметричної задач для шару, який нанесений на жорстку основу, при умові, що на зовнішній поверхні шару задано нормальні напруження у вигляді епюри Герца – найбільш простого випадку розподілу зовнішніх сил, що діють на плівку. На підставі точного розв'язку проведено аналіз поведінки напружень, їх максимальних значень в залежності від відношення розміру області навантаження до товщини шару.

Задля спрощення використовуваного математичного апарату інтегральних перетворень Фур'є і Фур'є-Ханкеля в статті ми обмежимося лише випадками парного та осесиметричного розподілів граничних навантажень, до яких відноситься, зокрема, розподіл Герца. У обох випадках побудовано точний розв'язок в переміщеннях і в напруженнях у вигляді інтегралів Фур'є і Ханкеля, який проілюстровано графічно. Зрозуміло, що випадок антисиметричної задачі не викликає математичних труднощів і може бути розглянутий окремо.

Плоска задача про напружений стан пружного шару на жорсткій основі при герцівському навантаженні. Розглянемо плоску задачу для пружного шару товщини h , жорстко закріпленого на нижній грані $z = 0$ до недеформівного півпростору та з заданим навантаженням у вигляді довільної парної функції $p(x)$ на частині границі $(-a; a)$ на верхній грані $z = h$.

Передбачаючи пружні властивості шару однорідними, рівняння рівноваги (рівняння Ламе) запишемо у вигляді

$$2 \frac{1-\nu}{1-2\nu} \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{u} - \operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{u} = 0, \tag{1}$$

де ν - коефіцієнт Пуасона. Граничні умови для парної задачі мають вигляд

$$\begin{aligned} \sigma_x|_{z=h} &= p(x), \quad \tau_{xz}|_{z=h} = 0, \\ u_x|_{z=0} &= 0, \quad u_z|_{z=0} = 0, \end{aligned} \tag{2}$$

Згідно відомого векторного розвинення Папковича-Нейбера [1,3,4] розв'язок для вектора переміщень можна подати у вигляді суперпозиції гармонічних скалярного та векторного полів

$$2G\vec{u} = 4(1-\nu)\vec{F} - \operatorname{grad}(\vec{r} \cdot \vec{F} + f), \tag{3}$$

Оскільки в нашій плоскій задачі напруження і переміщення не залежать від координати y , також врахувавши те, що одна із гармонічних функцій f, F_x, F_z довільна, і вибравши $F_x = 0$, а $F_z = F$ з (3) отримаємо

$$\begin{aligned} 2Gu_x &= -\frac{\partial f}{\partial x} - z \frac{\partial F}{\partial x}, \\ 2Gu_z &= (3-4\nu)F - \frac{\partial f}{\partial z} - z \frac{\partial F}{\partial z}, \end{aligned} \tag{4}$$

Відповідні формули для напружень будуть мати вигляд[4]

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\partial f}{\partial x} \right) + 2\nu \frac{\partial F}{\partial z} - z \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \\ \sigma_z &= \frac{\partial}{\partial z} \left[2(1-\nu)F - \frac{\partial f}{\partial z} \right] - z \frac{\partial^2 F}{\partial z^2}, \\ \tau_{xz} &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial f}{\partial z} + z \frac{\partial F}{\partial z} \right] + (1-2\nu) \frac{\partial F}{\partial x}, \end{aligned} \tag{5}$$

В цих формулах G - модуль зсуву. Представимо гармонічні функції f та F у вигляді косинус-інтегралів Фур'є

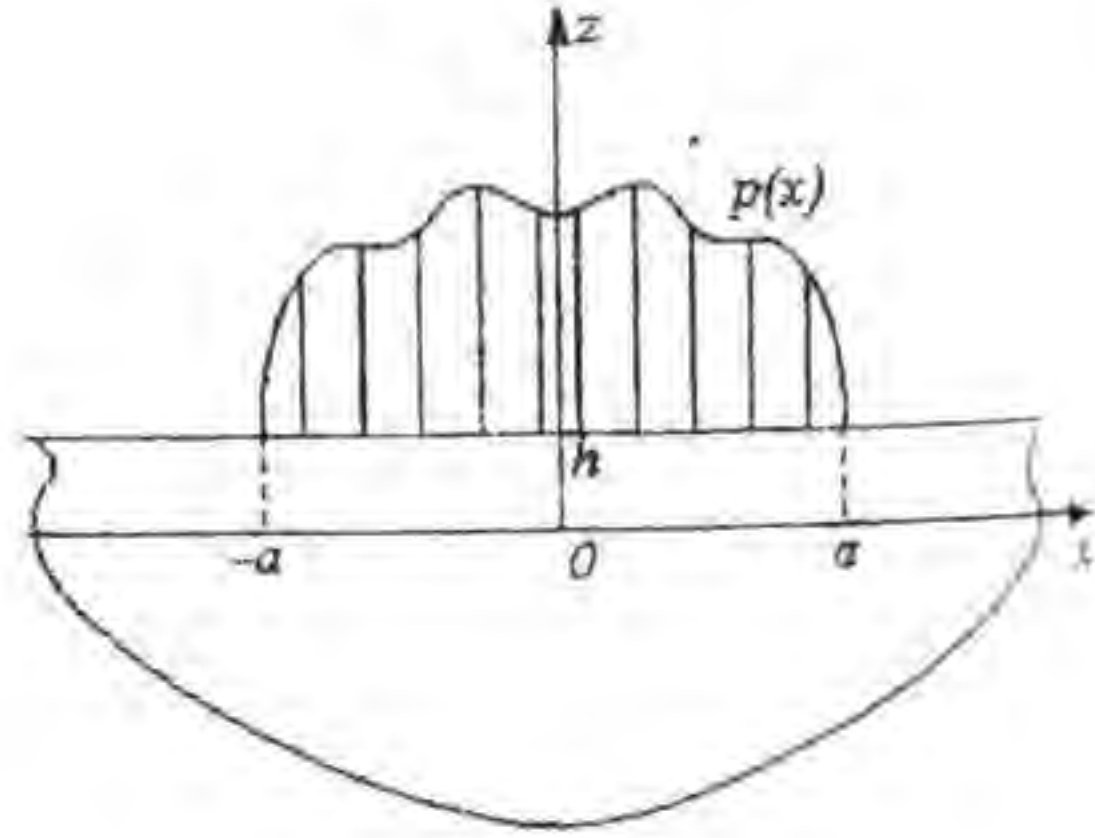


Рис. 1

$$f = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} [A(\lambda)e^{\lambda z} + B(\lambda)e^{-\lambda z}] \cos \lambda x d\lambda,$$

$$F = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} [C(\lambda)e^{\lambda z} + D(\lambda)e^{-\lambda z}] \cos \lambda x d\lambda, \quad \lambda - \text{дійсне} \quad (6)$$

Застосовуючи перетворення (6) до (4), (5) та використавши граничні умови (2) для визначення щільностей перетворення A, B, C, D отримаємо систему лінійних рівнянь

$$\begin{cases} -\lambda A - \lambda B = 0, \\ -\lambda A + \lambda B + (3 - 4\nu)C + (3 - 4\nu)D = 0, \\ -\lambda^2 A - \lambda^2 B e^{-2\lambda h} + (2\lambda(1 - \nu) - \lambda^2 h)C + (-2\lambda(1 - \nu) - \lambda^2 h)D e^{-2\lambda h} = \frac{\bar{p}(\lambda)}{e^{\lambda h}}, \\ \lambda^2 A - \lambda^2 B e^{-2\lambda h} + (-\lambda(1 - 2\nu) + \lambda^2 h)C + (-\lambda(1 - 2\nu) - \lambda^2 h)D e^{-2\lambda h} = 0, \end{cases} \quad (7)$$

тут $\bar{p}(\lambda) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} p(x) \cos \lambda x dx$ - косинус-перетворення Фур'є функції граничних умов.

Визначник цієї системи рівний

$$\Delta(\lambda h) = (3 - 4\nu) + [(3 - 4\nu)^2 + 1 + (2\lambda h)^2] e^{-2\lambda h} + (3 - 4\nu) e^{-4\lambda h}, \quad (8)$$

Знайшовши щільності A, B, C, D , підставивши їх в (6) знайдемо з (4), (5) вирази для переміщень і напружень

$$2Gu_z = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\bar{p}(\lambda)}{\lambda e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} [-3 + 10\nu - 8\nu^2 + \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(3 - 4\nu) +$$

$$+ e^{-2\lambda h} (3 - 10\nu + 8\nu^2 + \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(1 - 2\lambda h)) +$$

$$+ e^{-2\lambda z} (3 - 10\nu + 8\nu^2 - \lambda h(3 - 4\nu) + \lambda z(1 + 2\lambda h)) +$$

$$+ e^{-2\lambda(z+h)} (-3 + 10\nu - 8\nu^2 - \lambda h(3 - 4\nu) + \lambda z(3 - 4\nu))] e^{\lambda z} \sin \lambda x d\lambda, \quad (9)$$

$$2Gu_x = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\bar{p}(\lambda)}{\lambda e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} [6 - 14\nu + 8\nu^2 + \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(3 - 4\nu) +$$

$$+ e^{-2\lambda h} (6 - 14\nu + 8\nu^2 - \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(1 - 2\lambda h)) +$$

$$+ e^{-2\lambda z} (-6 + 14\nu - 8\nu^2 - \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(1 + 2\lambda h)) +$$

$$+ e^{-2\lambda(z+h)} (-6 + 14\nu - 8\nu^2 + \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(3 - 4\nu))] e^{\lambda z} \cos \lambda x d\lambda, \quad (10)$$

$$\sigma_z = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\bar{p}(\lambda h)}{e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} [(3 - 4\nu)(\lambda z - \lambda h - 1) + e^{-2\lambda h} (-5 + 12\nu - 8\nu^2 + \lambda h + \lambda z(1 - 2\lambda h)) +$$

$$+ e^{-2\lambda z} (-5 + 12\nu - 8\nu^2 - \lambda h - \lambda z(1 + 2\lambda h)) +$$

$$+ e^{-2\lambda(z+h)} (3 - 4\nu)(-1 + \lambda h - \lambda z)] e^{\lambda z} \cos \lambda x d\lambda, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \tau_{xz} = & \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\bar{p}(\lambda h)}{e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} [(3-4\nu)(\lambda h - \lambda z) + e^{-2\lambda h} (4-12\nu+8\nu^2 + \lambda h - \lambda z(1-2\lambda h)) + \\ & + e^{-2\lambda z} (-4+12\nu-8\nu^2 + \lambda h - \lambda z(1+2\lambda h)) + \\ & + e^{-2\lambda(z+h)} (3-4\nu)(\lambda h - \lambda z)] e^{\lambda z} \sin \lambda x d\lambda, \end{aligned} \quad (12)$$

Конкретний вигляд розв'язку можна отримати коли на верхній грані шару задано навантаження у вигляді епюри Герца, тобто

$$p(x) = \begin{cases} p_0 \sqrt{a^2 - x^2}, & |x| \leq a, \\ 0, & |x| > a, \end{cases} \quad p_0 = \text{const} \quad (13)$$

Слід зазначити, що перетворення Фур'є цього виразу буде рівним [5]

$$\bar{p}(\lambda) = p_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\pi a^2}{2} \frac{J_1(\lambda a)}{\lambda a} \quad (14)$$

тут $J_1(\lambda h)$ - функція Беселя. При такому навантаженні напруження які виникають на межі з'єднання пружного шару і жорсткого півпростору отримуються з формул (11), (12) підстановкою $z = 0$

$$\sigma_z|_{z=0} = \int_0^{\infty} \frac{4p_0 a J_1(\lambda a)}{\lambda e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} (1-\nu)[2(1-\nu) + \lambda h - e^{-2\lambda h} (2(1-\nu) - \lambda h)] \cos \lambda x d\lambda, \quad (15)$$

$$\tau_{xz}|_{z=0} = - \int_0^{\infty} \frac{4p_0 a J_1(\lambda a)}{\lambda e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} (1-\nu)[(1-2\nu) - \lambda h - e^{-2\lambda h} ((1-2\nu) + \lambda h)] \sin \lambda x d\lambda,$$

Поведінка цих напружень на інтервалі $(-a; a)$ (під штампом) показана на графіках (рис. 2) при різних значеннях відношення навантаженої області на границі до товщини шару a/h , у випадку, якщо $\nu = \frac{1}{3}, h = 1$ мм.

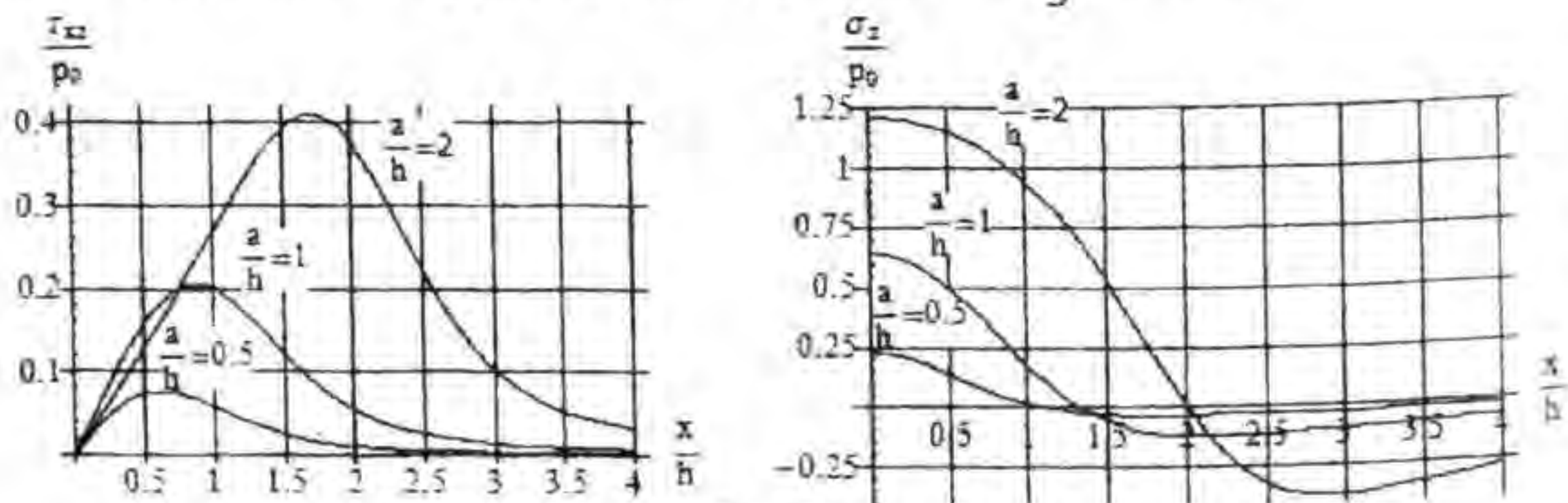


Рис. 2

Можна помітити, що при $a/h=1$, $a/h=2$ максимум дотичних напружень не виходить за межі площадки контакту, а при $a/h=0.5$ максимум дотичних напружень виходить за межі площадки контакту. Нормальні ж напруження, як і слід було очікувати досягають свого максимуму в точці за абсцисою 0 і поступово спадають з віддаленням від зони прикладення навантаження. У тих випадках, коли розмір зони прикладення навантаження є малим в порівнянні з товщиною плівки інтенсивність дотичних напружень τ_{xz} може бути значною, що слід враховувати технологічно під час нанесення плівки.

Осесиметрична задача про напружений стан пружного шару на жорсткій основі при герцівському навантаженні. Отримані вище результати можна узагальнити на випадок просторового осесиметричного розподілу навантаження на границі шару, що складає суттєвий інтерес на практиці.

Тепер будемо вважати, що

$H(r)$ – парна функція, яка задає навантаження на верхній границі в колі радіуса a , а поза цим колом нормальні й дотичні напруження рівні 0.

$$\sigma_z|_{z=h} = H(r), \quad \tau_{rz}|_{z=h} = 0, \quad (16)$$

$$u_r|_{z=0} = 0, \quad u_z|_{z=0} = 0,$$

Для побудови розв'язку будемо користуватись формулою Папковича-Нейбера (3). Оскільки граничні умови (16) є осесиметричними, то цілком природно, що напруження і переміщення шару є функціями лише r та z і не залежать від полярного кута φ . Цілком аналогічно до (4), (5) отримаємо для переміщень

$$2Gu_r = -\frac{\partial f}{\partial r} - z \frac{\partial F}{\partial r}, \quad (17)$$

$$2Gu_z = (3 - 4\nu)F - \frac{\partial f}{\partial z} - z \frac{\partial F}{\partial z},$$

і для напружень

$$\sigma_z = 2(1 - \nu) \frac{\partial F}{\partial z} - \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} - z \frac{\partial^2 F}{\partial z^2}, \quad (18)$$

$$\tau_{rz} = \frac{\partial}{\partial r} \left[(1 - 2\nu)F - \frac{\partial f}{\partial z} - z \frac{\partial F}{\partial z} \right],$$

Подамо гармонічні функції f та F у вигляді інтегралів Ханкеля:

$$f = \int_0^\infty (A(\lambda)e^{\lambda z} + B(\lambda)e^{-\lambda z}) J_0(\lambda r) \lambda d\lambda, \quad (19)$$

$$F = \int_0^\infty (C(\lambda)e^{\lambda z} + D(\lambda)e^{-\lambda z}) J_0(\lambda r) \lambda d\lambda, \quad \lambda - \text{дійсне}$$

Перетворюючи вирази для переміщень (17) і напружень (18) згідно формул (19) і використовуючи граничні умови (16), отримаємо таку ж саму як і в плоскому випадку систему лінійних алгебраїчних рівнянь відносно щільностей A, B, C, D , з точно таким же визначником (8). Відмінність полягає

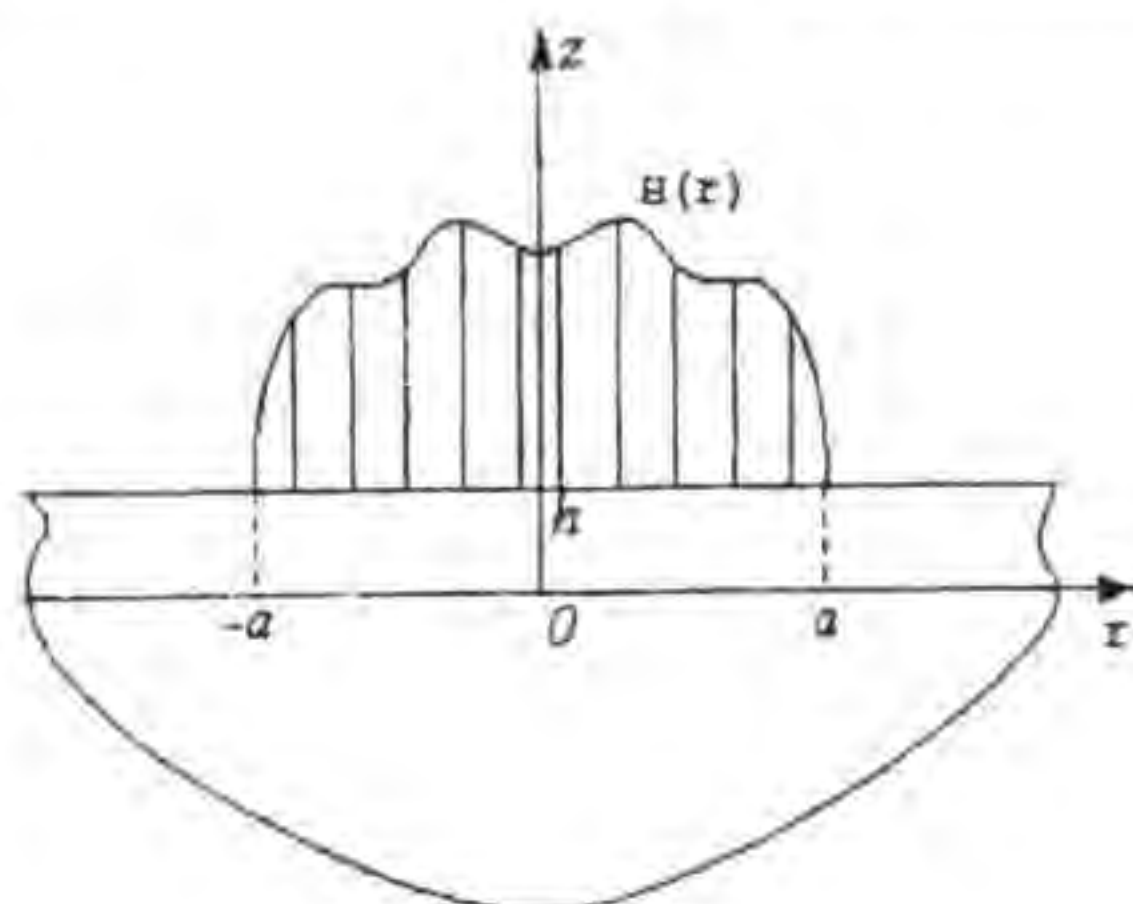


Рис. 3

тільки в зображенні за Ханкелем функції $H(r)$, що входить в праву частину рівнянь. Побудова розв'язку цілком аналогічна. В результаті отримаємо

$$2Gu_r = - \int_0^\infty \frac{\bar{H}(\lambda)}{e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} [-3 + 10\nu - 8\nu^2 + \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(3 - 4\nu) + \\ + e^{-2\lambda h} (3 - 10\nu + 8\nu^2 + \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(1 - 2\lambda h)) + \\ + e^{-2\lambda z} (3 - 10\nu + 8\nu^2 - \lambda h(3 - 4\nu) + \lambda z(1 + 2\lambda h)) + \\ + e^{-2\lambda(z+h)} (-3 + 10\nu - 8\nu^2 - \lambda h(3 - 4\nu) + \lambda z(3 - 4\nu))] e^{\lambda z} J_1(\lambda r) d\lambda, \quad (20)$$

$$2Gu_z = - \int_0^\infty \frac{\bar{H}(\lambda)}{e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} [6 - 14\nu + 8\nu^2 + \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(3 - 4\nu) + \\ + e^{-2\lambda h} (6 - 14\nu + 8\nu^2 - \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(1 - 2\lambda h)) + \\ + e^{-2\lambda z} (-6 + 14\nu - 8\nu^2 - \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(1 + 2\lambda h)) + \\ + e^{-2\lambda(z+h)} (-6 + 14\nu - 8\nu^2 + \lambda h(3 - 4\nu) - \lambda z(3 - 4\nu))] e^{\lambda z} J_0(\lambda r) d\lambda, \quad (21)$$

$$\sigma_z = \int_0^\infty \frac{\bar{H}(\lambda h)}{e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} [(3 - 4\nu)(-1 - \lambda h + \lambda z) + e^{-2\lambda h} (-5 + 12\nu - 8\nu^2 + \lambda h + \lambda z(1 - 2\lambda h)) + \\ + e^{-2\lambda z} (-5 + 12\nu - 8\nu^2 - \lambda h - \lambda z(1 + 2\lambda h)) + \\ + e^{-2\lambda(z+h)} (3 - 4\nu)(-1 + \lambda h - \lambda z)] e^{\lambda z} J_0(\lambda r) \lambda d\lambda, \quad (22)$$

$$\tau_{rz} = \int_0^\infty \frac{\bar{H}(\lambda h)}{e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} [(3 - 4\nu)(\lambda h - \lambda z) + e^{-2\lambda h} (4 - 12\nu + 8\nu^2 + \lambda h - \lambda z(1 - 2\lambda h)) + \\ + e^{-2\lambda z} (-4 + 12\nu - 8\nu^2 + \lambda h - \lambda z(1 + 2\lambda h)) + \\ + e^{-2\lambda(z+h)} (3 - 4\nu)(\lambda h - \lambda z)] e^{\lambda z} J_1(\lambda r) \lambda d\lambda, \quad (23)$$

У випадку, коли на верхній грані задано навантаження у вигляді епюри Герца

$$H(r) = \begin{cases} H_0 \sqrt{a^2 - r^2}, & |r| \leq a, \\ 0, & |r| > a, \end{cases} \quad (24)$$

Перетворення Ханкеля для нього буде рівним [6]:

$$\bar{H}(\lambda) = \frac{a^2}{\lambda} \left(\frac{\sin \lambda a}{(\lambda a)^2} - \frac{\cos \lambda a}{\lambda a} \right) \quad (25)$$

Аналогічним чином обрахуємо дотичні та нормальні напруження на межі розділу шару та півпростору, покладаючи в (22), (23) $z = 0$

$$\sigma_z = \int_0^\infty \frac{4H_0 a^2}{e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} \left(\frac{\sin \lambda a}{(\lambda a)^2} - \frac{\cos \lambda a}{\lambda a} \right) (1 - \nu) [2(1 - \nu) + \lambda h - e^{-2\lambda h} (2(1 - \nu) - \lambda h)] J_0(\lambda r) d\lambda, \\ \tau_{rz} = - \int_0^\infty \frac{4H_0 a^2}{e^{\lambda h} \Delta(\lambda h)} \left(\frac{\sin \lambda a}{(\lambda a)^2} - \frac{\cos \lambda a}{\lambda a} \right) (1 - \nu) [(1 - 2\nu) - \lambda h - e^{-2\lambda h} ((1 - 2\nu) + \lambda h)] J_1(\lambda r) d\lambda, \quad (26)$$

Поведінку нормальних та дотичних напружень можемо спостерігати на графіках ($\nu = \frac{1}{3}, h = 1 \text{ мм}$)

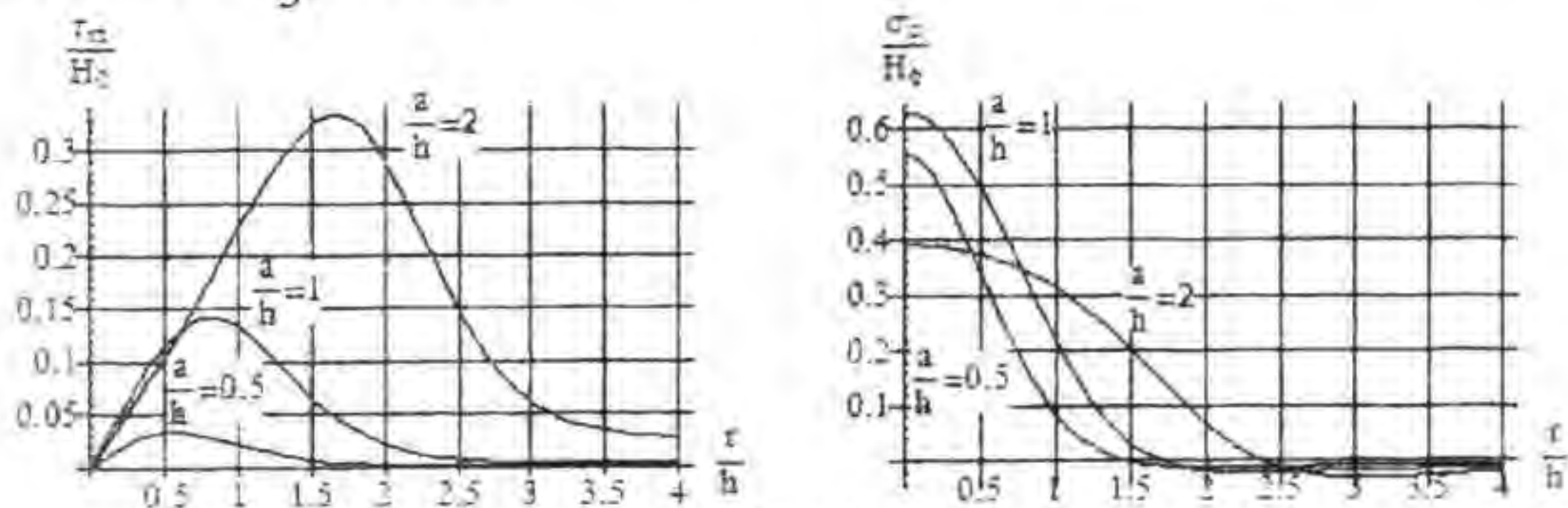


Рис. 4

Як можна бачити з графіків поведінка нормальних і дотичних напружень є цілком аналогічна тій, яка спостерігалась в плоскій задачі. При малих відношеннях a/h максимум дотичних напружень знаходиться поза зоною прикладення навантаження.

Висновки. В даній роботі отримано точний розв'язок плоскої та осесиметричної задач про напружений стан шару, жорстко закріпленого на нижній грані, та навантаженого на верхній грані нормальними напруженнями з розподілом Герца. Побудовано розподіли переміщень і напружень і вивчено напружений стан на межі з'єднання шару та півпростору: при досить великих відношеннях радіуса штампа до товщини шару ($a/h > 0.9$), максимум дотичних напружень не виходить за межі зони прикладання навантаження, але при цьому величина цих напружень може бути значною, що має враховуватись, наприклад, при виготовленні зразків з плівковими покриттями.

Література

1. Улитко А.Ф. Векторные разложения в пространственной теории упругости. - К.:Академперіодика, 2002.
2. Тимошенко С.П. Курс теории упругости. - К.: Наукова думка, 1973.
3. Мусхелишвили Н.И. Некоторые основные задачи математической теории упругости. - М.: Наука, 1966.
4. Уфлянд Я.С. Интегральные преобразования в задачах теории упругости. - М.: Наука, 1968.
5. Бейтмен Г., Эрдейи А., Таблицы интегральных преобразований. Т.1. Преобразование Фурье, Лапласа, Меллина. - М.:Наука, 1969.
6. Бейтмен Г., Эрдейи А., Таблицы интегральных преобразований. Т.2. Преобразования Бесселя, интегралы от специальных функций. - М.:Наука, 1970.

Надійшла до редакції 10.11.2005

УДК 5393

Леся В. Харитонова

Lesya V. Kharitonova

Аналіз розподілу прогину довгих гнучких циліндричних оболонок змінної кривизни в докритичній та закритичній областях

The analysis of the distribution of the deflection of the long flexible cylindrical shells with variable curvature in the subcritical and supercritical areas

На основі отриманого точного аналітичного розв'язку нелінійної крайової задачі про деформування гнучкої некругової довгої циліндричної оболонки змінної кривизни проведено аналіз розподілу прогину оболонки вздовж напрямної при нерівномірному навантаженні та жорсткому закріпленні поздовжніх країв в докритичній та закритичній областях деформування.

The nonlinear boundary value problem on the deformation of the flexible noncircular long cylindrical shell with variable curvature is formulated. The analysis of distribution of the deflection of the shell under nonuniform load along the directrix in subcritical and supercritical areas of the deformation is carried out. The clamped support of longitudinal edges is considered.

Ключові слова: некругова циліндрична оболонка, геометрична нелінійність, точний аналітичний розв'язок.

Keywords: noncircular cylindrical shell, geometrical nonlinearity, exact analytical solution.

E-mail: kharytonov@univ.kiev.ua

При дослідженні напружено-деформованого стану і стійкості тонких оболонкових конструкцій важливим є визначення величини критичних значень навантаження [1,2]. При цьому доцільно застосовувати геометрично нелінійну теорію гнучких оболонок, бо лінеаризована теорія не дає жодної інформації про закритичну поведінку оболонок.

Для розв'язання нелінійних крайових задач теорії оболонок найчастіше застосовуються різні наближені та чисельні методи [2]. Але, поряд з цим, в окремих випадках існує можливість отримання точного аналітичного розв'язку в докритичній та закритичній областях. Одна з таких задач була розглянута в статті [3] для кругової нескінченно довгої оболонки при рівномірному навантаженні. Загальний підхід до розв'язання задач деформування некругових оболонок при нерівномірному навантаженні запропоновано в статті [4].

В даній статті на основі загальних рівнянь геометрично нелінійної теорії пологих оболонок [1,2] розглядається підхід до розв'язання задачі про деформування гнучкої нескінченно довгої циліндричної оболонки з некруговим поперечним перерізом та постійною товщиною при нерівномірному навантаженні вздовж прямої та жорсткому закріпленні поздовжніх країв. Вважаємо, що кривизна оболонки та навантаження задаються, відповідно, законами:

$$k_y(y) = k_0(1 + \gamma_0 y^2), \quad q(y) = q_0(1 + \delta_0 y^2), \quad (1)$$

де k_y – кривизна оболонки, $k_0 = \text{const}$ – кривизна кола радіусом r_0 ($k_0 = \frac{1}{r_0}$),

q – навантаження, $q_0 = \text{const}$, y , $-b \leq y \leq b$ – координата точки поперечного перерізу оболонки, $\gamma_0 = \text{const}$, $\delta_0 = \text{const}$ – параметри кривизни і навантаження.

В такому випадку задача зводиться до системи двох розв'язувальних звичайних диференціальних рівнянь у безрозмірних величинах [5-7]:

$$\frac{dv^*}{d\eta} - \varphi(\eta)w^* + \frac{1}{2}\left(\frac{dw^*}{d\eta}\right)^2 = -\frac{4}{3}\frac{\mu^2}{(k^*)^2}, \quad (2)$$

$$\frac{d^4 w^*}{d\eta^4} + \mu^2 \frac{d^2 w^*}{d\eta^2} = -\mu^2 \varphi(\eta) + q^* \psi(\eta), \quad (3)$$

де

$$\varphi(\eta) = 1 + \gamma\eta^2, \quad \psi(\eta) = 1 + \delta\eta^2. \quad (4)$$

В рівняннях (2)-(4) використані такі безрозмірні величини:

$$\eta = \frac{y}{b} \quad (-1 \leq \eta \leq 1), \quad w^* = \frac{w}{k_0 b^2}, \quad v^* = \frac{v}{k_0^2 b^2}, \quad \mu = b\lambda, \quad \lambda = -\frac{N_y}{D_M},$$

$$q^* = \frac{b^2}{k_0 D_M} q_0, \quad k^* = \frac{4k_0 b^2}{h} = \frac{4b^2}{r_0 h}, \quad \gamma = \gamma_0 b^2, \quad \delta = \delta_0 b^2,$$

де w – нормальне переміщення (прогин), v – тангенціальне переміщення,

N_y – зусилля за прямою ($N_y < 0$), $D_M = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)}$ – згина жорсткість,

E – модуль Юнга, ν – коефіцієнт Пуассона, $h = \text{const}$ – товщина оболонки. Відзначимо, що в роботі [4] було зроблено важливий висновок про постійність зусилля N_y в точках поперечного перерізу оболонки.

Система (2),(3) має шостий порядок і за умови жорсткого закріплення країв повинна задовольняти по три граничні умови на кожному краю:

$$w^*(\pm 1) = 0, \left. \frac{dw^*}{d\eta} \right|_{\eta=\pm 1} = 0, v^*(\pm 1) = 0. \quad (5)$$

Відзначимо, що одну з умов для v^* можна записати у вигляді:

$$\Delta = \int_{-1}^1 \frac{dv^*}{d\eta} d\eta = 0, \quad (6)$$

яка виражає відсутність зближення країв оболонки.

Залежність $w^*(q^*)$, що визначається рівнянням (3) є нелінійною, бо хоча (3) і є лінійним диференціальним рівнянням з постійними коефіцієнтами, $\mu^2 = b^2 \lambda^2 = -\frac{N_y b^2}{D_m}$, а N_y є нелінійною функцією q^* .

Розв'язок диференціального рівняння (3), що задовольняє граничним умовам (5), має вигляд:

$$w^* = \left(\alpha + \frac{\beta}{3} \right) \left[\frac{\cos \mu \eta - \cos \mu}{\mu \sin \mu} + \frac{\eta^2 - 1}{2} \right] + \frac{\beta}{12} (\eta^2 - 1)^2, \quad (7)$$

де коефіцієнти α і β залежать від параметрів кривизни і навантаження γ і δ :

$$\alpha = \left(1 - \frac{2\delta}{\mu^2} \right) \frac{q^*}{\mu^2} - \left(1 - \frac{2\gamma}{\mu^2} \right), \quad \beta = \frac{\delta q^*}{\mu^2} - \gamma. \quad (8)$$

Таким чином, отриманий розв'язок дозволяє легко проводити дослідження впливу параметрів навантаження і кривизни на прогин оболонки. Враховуючи вираз (7) в рівнянні (2) і задовольняючи граничну умову (6), після інтегрування отримаємо квадратне рівняння відносно q^* , що пов'язує безрозмірний параметр навантаження q^* з безрозмірним параметром зусилля μ :

$$\frac{a}{\mu^4} (q^*)^2 + \frac{b}{\mu^2} q^* + c = 0, \quad (9)$$

де

$$\begin{aligned} a &= N_1 \sin^2 \mu + \frac{N_2}{\mu} \sin \mu \cos \mu - \frac{A^2}{2} \cos^2 \mu, \\ b &= N_3 \sin^2 \mu + \frac{N_4}{\mu} \sin \mu \cos \mu + AB \cos^2 \mu, \\ c &= N_5 \sin^2 \mu - \frac{8}{3} \left(\frac{\mu}{k^*} \right)^2 \sin^2 \mu + \frac{N_6}{\mu} \sin \mu \cos \mu - \frac{B^2}{2} \cos^2 \mu; \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned}
 N_1 &= -\frac{1}{3}\left(1 + \frac{2}{5}\delta + \frac{\delta^2}{21}\right) + \frac{2}{\mu^2}\left(1 + 2\delta + \frac{7}{15}\delta^2\right) - \\
 &\quad - \frac{12}{\mu^4}\left(\delta + \frac{2\delta^2}{3}\right) + \frac{16\delta^2}{\mu^6} - \frac{A^2}{2}, \\
 N_2 &= -\frac{3}{2}\left(1 + \frac{2}{3}\delta + \frac{\delta^2}{9}\right) + \frac{10}{\mu^2}\left(\delta + \frac{\delta^2}{3}\right) - 14\frac{\delta^2}{\mu^4}, \\
 N_3 &= -\frac{2}{\mu^2}\left(1 + \delta + \gamma + \frac{7}{15}\delta\gamma\right) + \\
 &\quad + \frac{8}{\mu^4}\left(\delta + \gamma + \frac{4}{3}\delta\gamma\right) - 24\frac{\delta\gamma}{\mu^6} + AB, \\
 N_4 &= \left(1 + \frac{\delta}{3} + \frac{\gamma}{3} + \frac{\delta\gamma}{9}\right) - \frac{6}{\mu^2}\left(\delta + \gamma + \frac{2}{3}\delta\gamma\right) + 20\frac{\delta\gamma}{\mu^4}, \\
 N_5 &= \frac{1}{3}\left(1 + \frac{2}{5}\gamma + \frac{\gamma^2}{21}\right) - \frac{4}{\mu^4}\left(\gamma + \frac{2}{3}\gamma^2\right) + \frac{8\gamma^2}{\mu^6} - \frac{B^2}{2},
 \end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned}
 N_6 &= \frac{1}{2}\left(1 + \frac{2}{3}\gamma + \frac{\gamma^2}{9}\right) + \frac{2}{\mu^2}\left(\gamma + \frac{\gamma^2}{3}\right) - 6\frac{\gamma^2}{\mu^4}, \\
 A &= 1 - \frac{2\delta}{\mu^2} + \frac{\delta}{3}, \quad B = 1 - \frac{2\gamma}{\mu^2} + \frac{\gamma}{3}.
 \end{aligned} \tag{12}$$

Таким чином, точний аналітичний розв'язок нелінійної крайової задачі (2)-(6) отримано у вигляді двох залежностей (7),(9). У виразі (7) прогин w^* явно залежить від безрозмірної координати η та величин μ і q^* – параметрів зусилля за напрямною N_y і навантаження. Залежність (9) отримана у вигляді квадратного рівняння відносно параметра навантаження q^* з коефіцієнтами, які залежать від параметра зусилля μ .

Отже, для отримання залежності прогину w^* від навантаження q^* в різних точках поперечного перерізу оболонки, необхідно підставити визначений з (9) параметр зусилля μ у (7). Проте, враховуючи що залежність (9) з урахуванням (10) є складним нелінійним рівнянням відносно μ і, в той же час, являє собою квадратне рівняння відносно q^* , дослідження впливу параметру навантаження q^* на величину прогину в різних точках перерізу оболонки легше проводити розглядаючи залежність $w^*(q^*)$ як параметричну з параметром μ .

Слід зазначити, що при $\mu = \pi$ рівняння (9) має рівні корені, що не залежать від узагальненого геометричного параметра k^* , який характеризує співвідношення між кривизною і товщиною оболонки.

Залежності $q^*(w^*)$, отримані при різних значеннях k^* та при фіксованому $\eta = 0$, проілюстровані на рис.1 на прикладі кругової оболонки ($\gamma = 0$) при рівномірному навантаженні ($\delta = 0$).

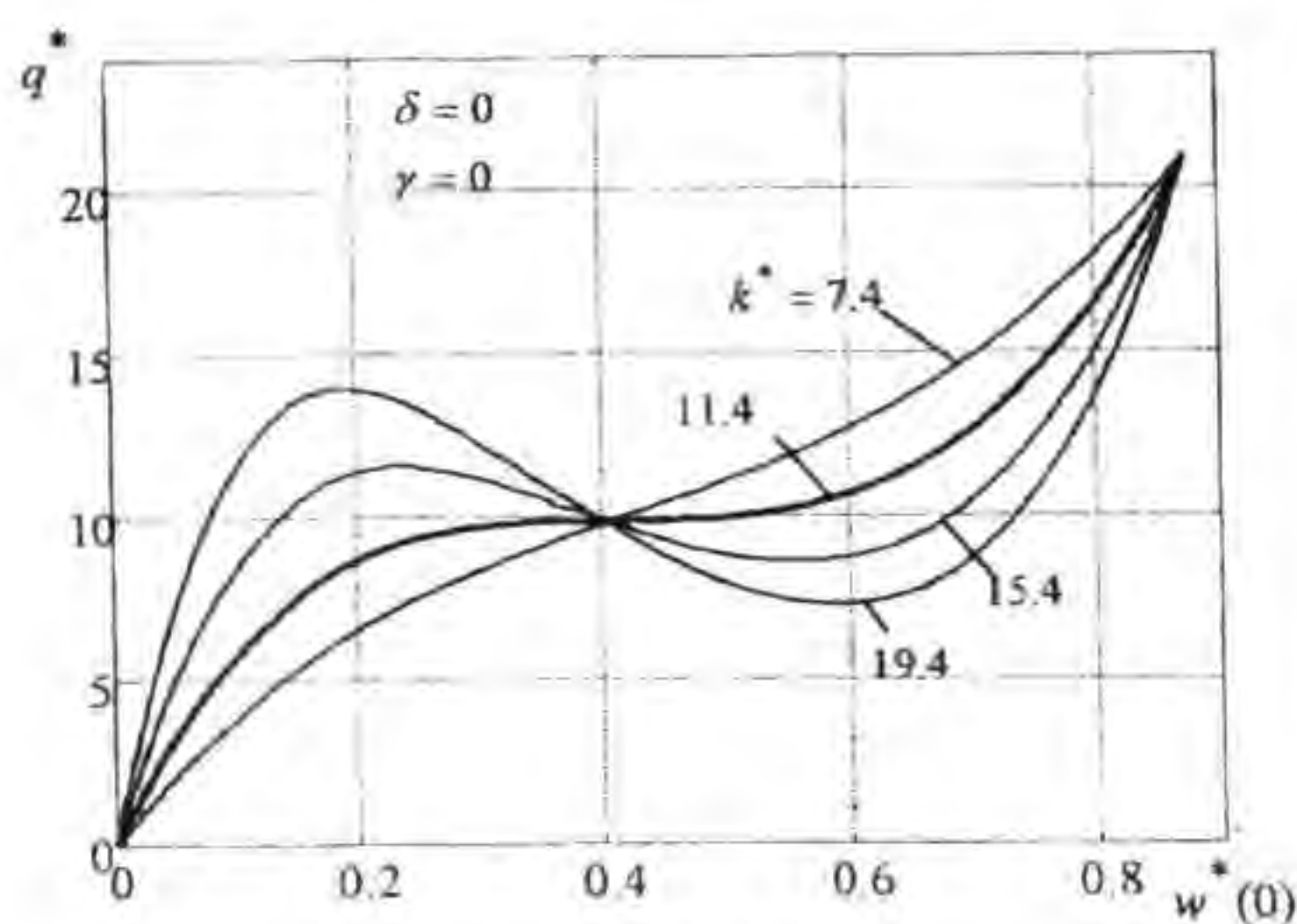


Рис. 1.

утворює гострий (для кривих, що відповідають докритичному характеру деформування) або тупий (для кривих, що відповідають закритичному характеру деформування) кут з додатним напрямом цієї осі. Значення параметра $\tilde{k}^*$ визначається з умови рівності нулю дискримінанта рівняння (9), за формулою [7]:

$$\tilde{k}^* = \frac{4\pi^2 A}{\left[6\pi^2 (A^2 N_5 + B^2 N_1 + AB N_3) + 3(N_4^2 - 4N_2 N_6)\right]^{1/2}}. \quad (13)$$

Монотонно зростаючі криві, яким відповідають значення $k^* < \tilde{k}^*$, належать до докритичної області. У закритичній області, при $k^* > \tilde{k}^*$, криві мають точки максимуму і мінімуму, які називаються, відповідно, верхніми і нижніми критичними точками. При досягненні верхнього критичного значення навантаження q^* оболонка втрачає стійкість і відбувається стрибкоподібний перехід до суміжної віддаленої форми рівноваги (так званий "хлопок").

На рис.1 слід відзначити жирну криву (назвемо її нейтральною; їй відповідає значення геометричного параметру $k^* = \tilde{k}^*$), що розділяє докритичну ($k^* < \tilde{k}^*$) та закритичну ($k^* > \tilde{k}^*$) області деформування. Дотична до нейтральної кривої, проведена в точці $\mu = \pi$, паралельна осі Ow^* , в той час, як для інших кривих вона

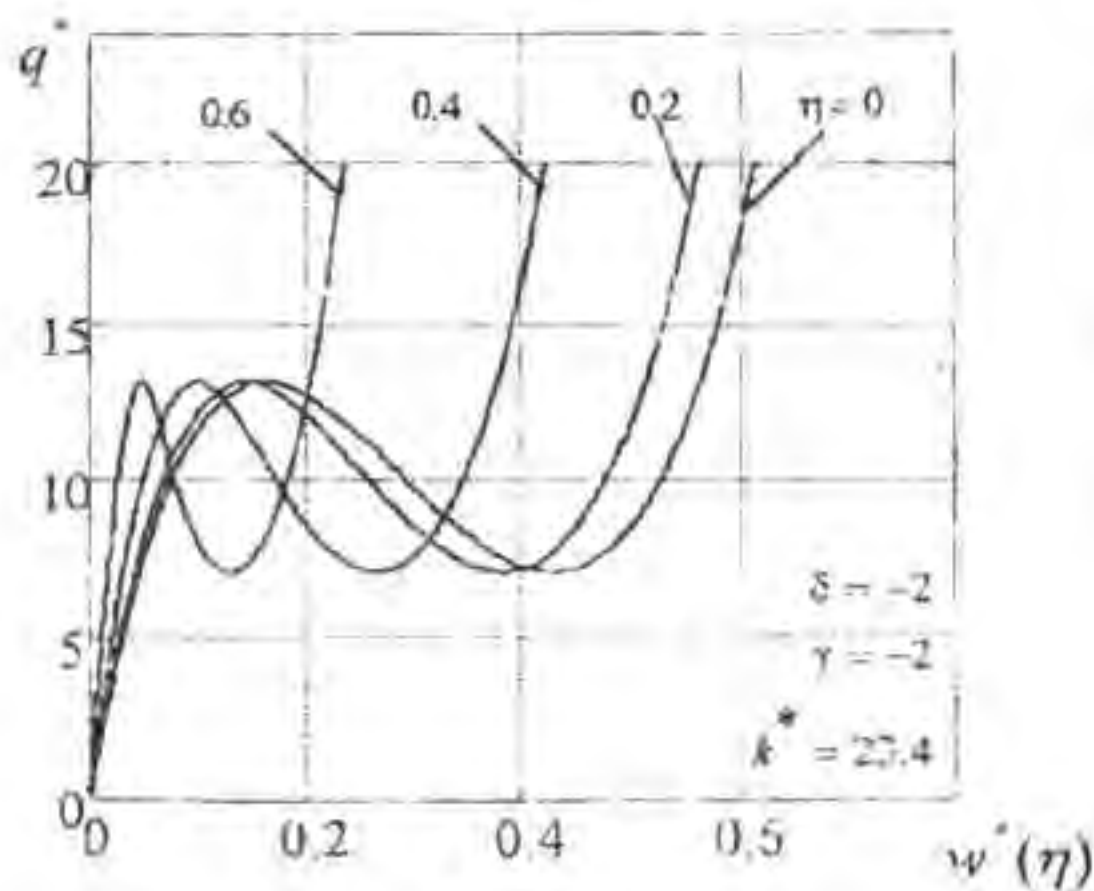


Рис. 2.

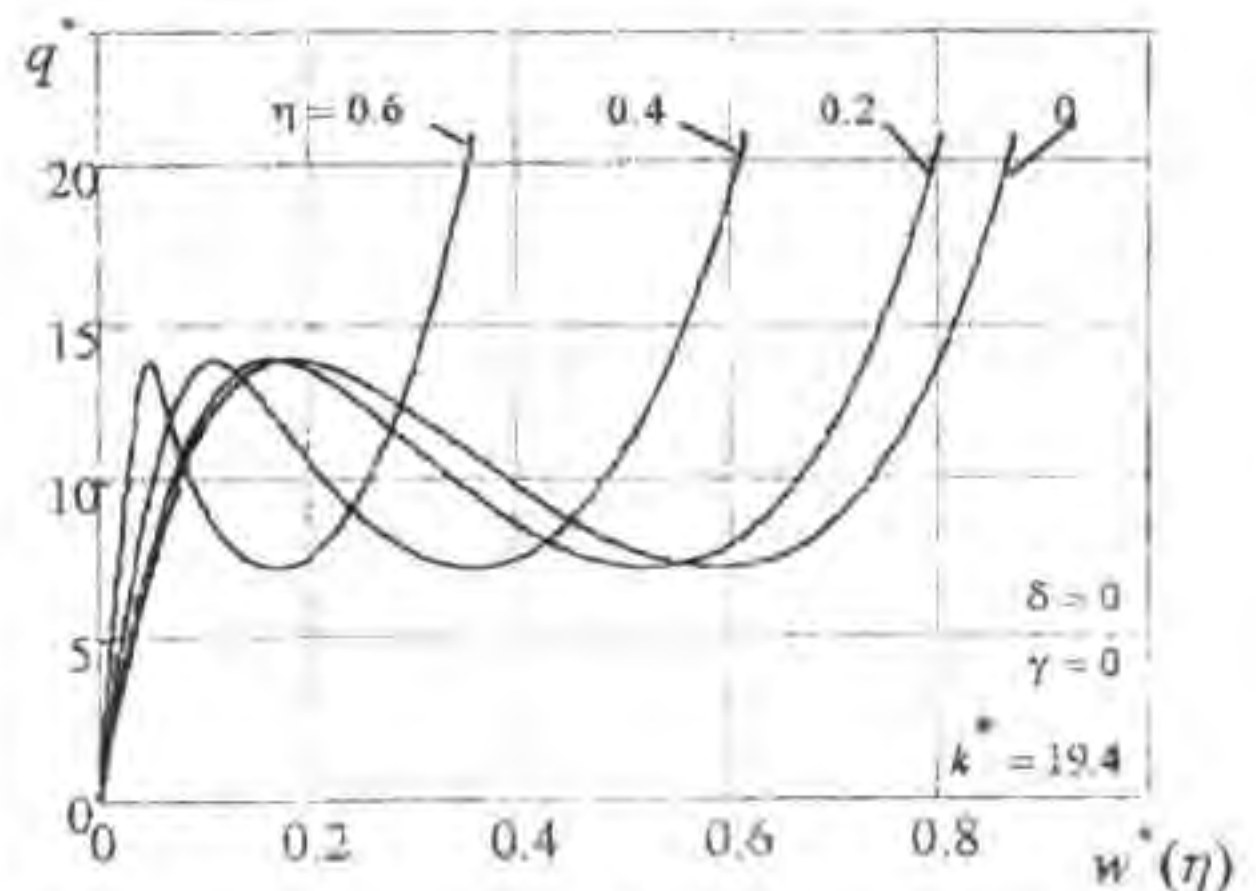


Рис. 3.

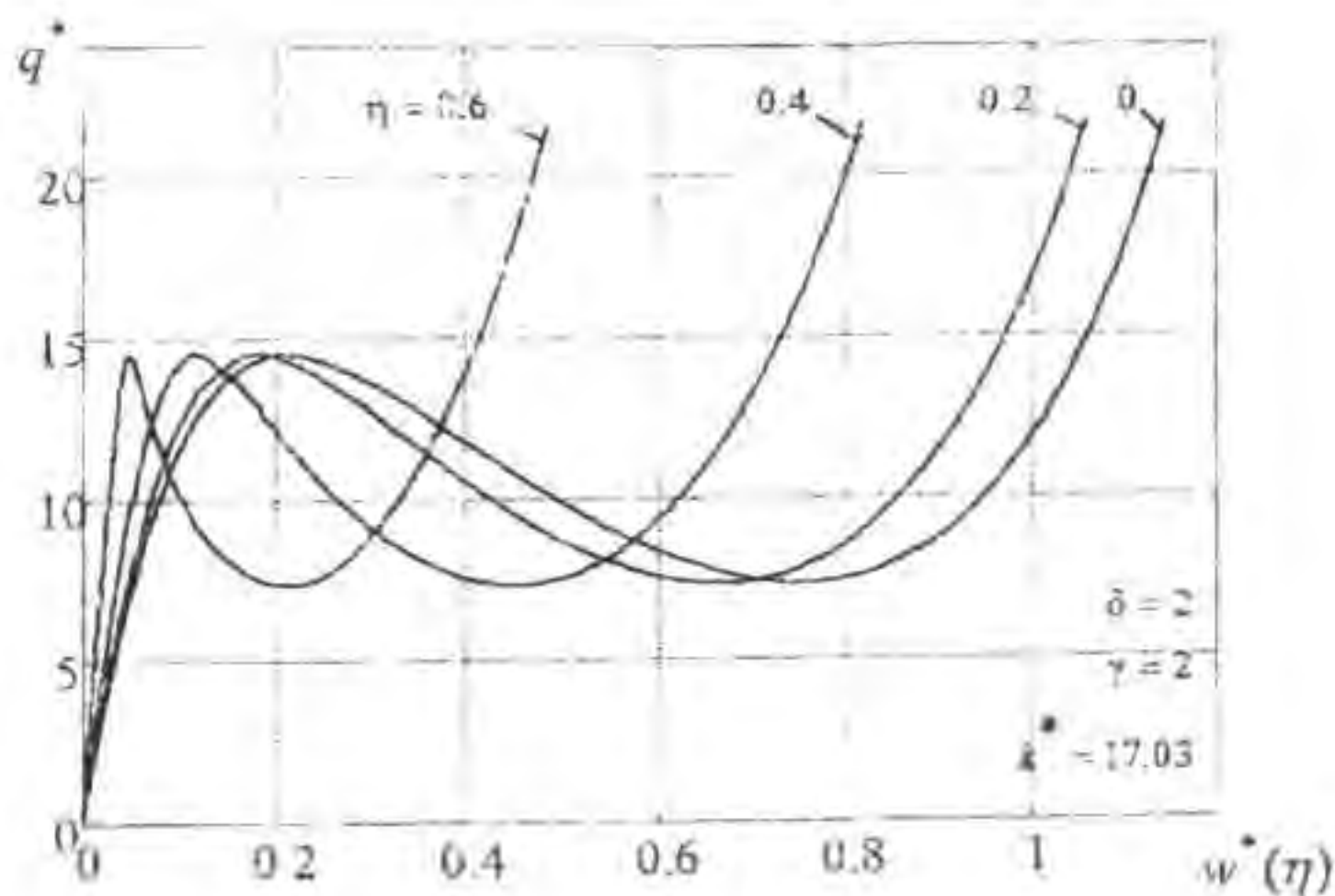


Рис. 4.

На рис.2-4 наведено графіки залежностей $w^*(q^*)$ в різних точках перерізу оболонки (при $\eta = 0; 0,2; 0,4; 0,6$) для кругової оболонки ($\gamma = 0$) при рівномірному навантаженні ($\delta = 0$) на рис. 3 та для некругових оболонок ($\gamma = \pm 2$) при нерівномірному навантаженні ($\delta = \pm 2$), відповідно, на рис.2 і 4. Наведені криві характерні закритичним деформуванням (наявністю "хлопка"). Як видно з рис.2-4, при фіксованих значеннях δ і γ і різних η криві $w^*(q^*)$ мають однакові критичні значення q^* , але вони досягаються при різних прогинах w^* . При збільшенні η (тобто при наближенні до краю оболонки) критичні навантаження q^* досягаються при менших значеннях прогину.

Якщо порівняти залежності $w^*(q^*)$ при різних значеннях δ і γ , то з рис.2-4 видно, що зі збільшенням кривизни оболонки і навантаження, що відбувається при збільшенні δ і γ , при однакових значеннях η ($\eta = 0; 0,2; 0,4; 0,6$) верхні критичні значення навантаження q^* збільшуються, в той час як нижні критичні значення зменшуються. Крім того, при збільшенні δ і γ критичні значення навантаження досягаються при більших значеннях прогину.

Таким чином, наявність точних аналітичних розв'язків нелінійної крайової задачі дозволяє досліджувати поведінку гнучкої циліндричної оболонки в докритичній і закритичній областях при різних значеннях кривизни в поперечному перерізі (γ) і величини нерівномірності навантаження (δ) в усіх точках оболонки.

Література

1. Власов В.З. Общая теория оболочек и ее приложения в технике. – М.: Л.: Гостехиздат, 1949. – 784 с.
2. Grigorenko Ya.M., Savula Ya.G., Mukha I.S. Linear and nonlinear problems on the elastic deformation of complex shells and methods of their numerical solution // Int. Appl. Mech. – 2000. – 36, № 8. – P. 979 – 1000.
3. Корнишин М.С., Муштари Х.М. Устойчивость бесконечно длинной пологой цилиндрической панели под действием нормального равномерного давления. – Изв. Казанск. филиала АН СССР, Сер. физ.-мат. и техн. наук, 1955, вып. 7, с. 36 – 50.
4. Григоренко Я.М. До розв'язання задачі про деформацію гнучкої довгої циліндричної оболонки зі змінними параметрами // Доп. АН УРСР. Сер. А. – 1977. – № 5. – С. 417 – 421.
5. Григоренко Я.М., Мольченко Л.В. Основы теории пластин та оболонок. – К.: Либідь, 1993. – 232 с.
6. Григоренко Я.М., Харитонов Л.В. Влияние граничных условий на устойчивость и закритическое поведение гибких некруговых длинных цилиндрических панелей // Докл. НАН Украины. – 1995. – № 7. – С. 35 – 37.
7. Григоренко Я.М., Харитонов Л.В. К определению критических значений нагрузки при деформировании гибких некруговых цилиндрических оболочек с жестко закрепленными краями // Прикл. механика. – 2005. – 41, № 11. – С. 78 – 87.

Надійшла до редколегії 20.12.2005 р.

УДК 539.3

Наталія С. Яковенко

**Розрахунок циліндричних
оболонки з косими зрізами за
допомогою сплайн-функцій**

Дано розв'язання задачі про напружено-деформований стан кругових циліндричних оболонок з косими зрізами. Воно базується на параметризації циліндричної поверхні з косими зрізами і використанні методу сплайн-колокації. Проаналізовано вплив змінності косокутності на поля переміщень кругових циліндрів з косими зрізами.

Ключові слова: циліндрична оболонка з косими зрізами, напружено-деформований стан, метод сплайн-колокації.

Nataliya S. Yakovenko

**Calculation of cylindrical shells
with slant cuts by spline-functions**

A solution of the problem on stress strain state of circular cylindrical shells with slant cuts is given. It is based on parameterization of a cylindrical surface with slant cuts and use of a method of spline collocation. Influence of geometrical parameters on fields of displacements of circular cylinders with slant cuts is analyzed.

Key Words: cylindrical shells with slant cuts, stress strain state, method of spline collocation.

В багатьох випадках елементами різноманітних конструкцій є тонкі циліндричні оболонки з складною конфігурацією границі, зокрема, замкнуті оболонки в коловому напрямку з косими зрізами. В порівнянні з дослідженням циліндричних оболонок з ортогональними границями їм приділено не так багато уваги. Це пояснюється тим, що використання відомих методів дослідження двовимірних крайових задач в непрямокутній області пов'язано з великими складностями математичного та обчислювального характеру [1, 2, 3, 4].

Дослідження деформації циліндричних оболонок постійної жорсткості при різних способах закріплення контурів і навантаження розглядались в роботах [5, 6]. Зокрема, в роботі [5] використовується метод сіток. Теорія R-функцій в поєднанні з варіаційними методами використовується в роботі [6]. Останнім часом при розв'язуванні крайових задач теорії оболонок знаходять застосування сплайн-функції. Використання сплайн-функцій при розв'язуванні двовимірних задач про напружено-деформований стан пологих оболонок з прямокутним планом показало їх високу ефективність [2, 3, 4].

В даній статті запропоновано підхід до розв'язання задач статички тонких циліндричних оболонок з косими зрізами, який базується на параметризації заданої поверхні і використанні методу сплайн-колокації [1, 7] для розв'язування ускладненої крайової задачі в канонічній області.

Розглянемо тонку ізотропну циліндричну оболонку постійної товщини h радіуса R з косими границями, які утворюються при перетині циліндричної поверхні площинами, які перпендикулярні до площини rOz і нахилені під кутом α до площин $z=0$ і $z=L$. В циліндричній системі координат r, θ, z згин циліндричної оболонки під дією поперечного навантаження q описується наступною системою диференціальних рівнянь в частинних похідних [2, 8]:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{1-\nu}{2R^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \frac{1+\nu}{2R} \frac{\partial^2 v}{\partial z \partial \theta} - \frac{\nu}{R} \frac{\partial w}{\partial z} = 0; \quad (1)$$

$$\frac{1+\nu}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial z \partial \theta} + R \frac{1-\nu}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} - \frac{1}{R} \frac{\partial w}{\partial \theta} = 0; \quad (2)$$

$$\nu \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{R} \frac{\partial v}{\partial \theta} - \frac{1}{R} w - \frac{h^2}{12} \left(R \frac{\partial^4 w}{\partial z^4} + \frac{2}{R} \frac{\partial^4 w}{\partial z^2 \partial \theta^2} + \frac{1}{R^3} \frac{\partial^4 w}{\partial \theta^4} \right) = - \frac{R(1-\nu^2)}{Eh} q. \quad (3)$$

Тут u, v, w – переміщення серединної поверхні вздовж осі обертання, в коловому і нормальному напрямках відповідно; h – товщина оболонки, R – радіус серединної поверхні оболонки; E – модуль пружності; ν – коефіцієнт Пуассона.

Розглянемо згин циліндричної оболонки в новій криволінійній системі координат ξ, η, ζ [9]:

$$\begin{cases} \xi = z - R(1 + \cos \theta) \operatorname{tg} \alpha, \\ \eta = \theta. \end{cases} \quad (4)$$

Координатними лініями в цій системі є лінії $\eta = \text{const}$ (твірні циліндра, які стиснуті в напрямку осі z) і $\xi = \text{const}$ (лінії перетину циліндричної поверхні і площин, які нахилені під кутом α до осі обертання Oz) (рис. 1).

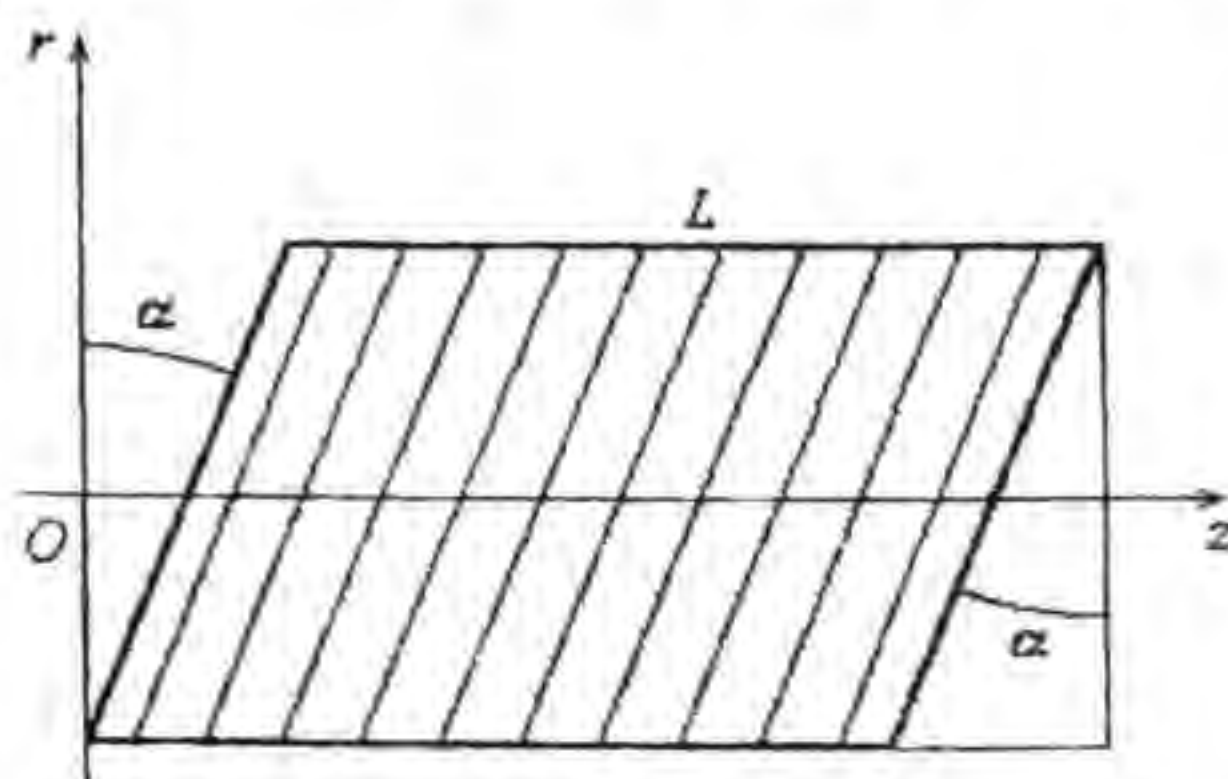


Рис 1. Циліндрична оболонка з косими зрізами

В криволінійній системі координат (ξ, η) двовимірною крайовою задачею вже розглядається в прямокутній області $R = \{ \xi_0 \leq \xi \leq \xi_1; \eta_0 \leq \eta \leq \eta_N \}$.

Система рівнянь (1) – (3) в системі координат ξ, η, ζ приймає вигляд:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} = C_1 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + C_2 \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} + C_3 \frac{\partial u}{\partial \xi} + C_4 \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} + C_5 \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} + C_6 \frac{\partial u}{\partial \xi} + C_7 \frac{\partial w}{\partial \xi} + C_8 \frac{\partial w}{\partial \eta}; \quad (5)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} = D_1 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + D_2 \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} + D_3 \frac{\partial u}{\partial \xi} + D_4 \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} + D_5 \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} + D_6 \frac{\partial u}{\partial \xi} + D_7 \frac{\partial w}{\partial \xi} + D_8 \frac{\partial w}{\partial \eta}; \quad (6)$$

$$\frac{\partial^4 w}{\partial \xi^4} = F_1 \frac{\partial u}{\partial \xi} + F_2 \frac{\partial v}{\partial \xi} + F_3 \frac{\partial v}{\partial \eta} + F_4 \frac{\partial^4 w}{\partial \xi^3 \partial \eta} + F_5 \frac{\partial^4 w}{\partial \xi^2 \partial \eta^2} + F_6 \frac{\partial^4 w}{\partial \xi \partial \eta^3} + F_7 \frac{\partial^4 w}{\partial \eta^4} + F_8 \frac{\partial^3 w}{\partial \xi^3} + F_9 \frac{\partial^3 w}{\partial \xi^2 \partial \eta} + F_{10} \frac{\partial^3 w}{\partial \xi \partial \eta^2} + F_{11} \frac{\partial^2 w}{\partial \xi^2} + F_{12} \frac{\partial^2 w}{\partial \xi \partial \eta} + F_{13} \frac{\partial w}{\partial \xi} + F_{14} w + F_{15} q. \quad (7)$$

Якщо границі тонкої циліндричної оболонки жорстко закріплені, то граничні умови на косих границях оболонки мають вигляд

$$u = v = w = \frac{\partial w}{\partial \eta} = 0. \quad (8)$$

Розв'язок крайової задачі (5) – (7), (8) будемо шукати у вигляді [1]:

$$u(\xi, \eta) = \sum_{i=0}^N u_i(\xi) \varphi_i(\eta), \quad (9)$$

$$v(\xi, \eta) = \sum_{i=0}^N v_i(\xi) \vartheta_i(\eta), \quad (10)$$

$$w(\xi, \eta) = \sum_{i=0}^N w_i(\xi) \psi_i(\eta), \quad (11)$$

де $u_i(\xi), v_i(\xi), w_i(\xi)$ ($i = \overline{0, N}$) – невідомі функції, а $\varphi_i(\eta), \vartheta_i(\eta)$ і $\psi_i(\eta)$ ($i = \overline{0, N}$) – відповідно лінійні комбінації В-сплайнів 3-го і 5-го степеня на рівномірній сітці точок $\eta_0 < \eta_1 < \eta_2 < \dots < \eta_N$, які задовольняють умови періодичності на контурах оболонки $\eta = \eta_0, \eta = \eta_1$.

Після застосування методу сплайн-колокації отримаємо систему $8 \times (N + 1)$ звичайних диференціальних рівнянь в матричній формі:

$$\frac{d\bar{Y}}{d\xi} = A(\xi)\bar{Y} + \bar{f}(\xi), \quad (12)$$

де

$$\bar{Y} = \{u_0, \dots, u_N, u'_0, \dots, u'_N, v_0, \dots, v_N, v'_0, \dots, v'_N, w_0, \dots, w_N, w'_0, \dots, w'_N, w''_0, \dots, w''_N, w'''_0, \dots, w'''_N\}^T, \\ u_s^{(m)}(r) = u^{(m)}(\xi, \bar{\eta}_s), \quad v_s^{(m)}(r) = v^{(m)}(\xi, \bar{\eta}_s) \quad (m = 0, 1), \quad w_s^{(l)}(r) = w^{(l)}(\xi, \bar{\eta}_s) \quad (l = \overline{0, 3}), \\ s = \overline{1, N+1}.$$

Сформулюємо граничні умови на контурах $\xi = \xi_0$, $\xi = \xi_1$ у вигляді:

$$B_1 \bar{Y}(\xi_0) = b_1, \quad B_2 \bar{Y}(\xi_1) = b_2 \quad (13)$$

Крайову задачу (12), (13) розв'язуємо стійким чисельним методом дискретної ортогоналізації [1].

Для ілюстрації запропонованого підходу розглянемо згин замкненої в коловому напрямку циліндричної оболонки постійної товщини $h = h_0$, яка проектується в паралелограм на площині rOz , під дією внутрішнього тиску $q = q_0$. Косі зрізи $\xi = \xi_0$, $\xi = \xi_1$ циліндричної оболонки жорстко закріплені. В силу симетрії задача розв'язувалась на інтервалі $0 \leq \eta \leq \pi$ при наступних значеннях параметрів: $\xi_0 = 0$, $\xi_1 = 60$, $L = 60$, $E = 1$, $\nu = 0,3$, $q_0 = 1$, $h_0 = 1$, $R = 20$.

В табл.1 наведено розподіли прогину wE/q в коловому перерізі $\xi = L/2$ для різних значеннях кута $\alpha \in \{0^\circ, 10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 50^\circ\}$.

Таблиця 1. Розподіл прогинів wE/q в коловому перерізі $\xi = L/2$

$\theta \backslash \alpha$	0°	10°	20°	30°	40°	50°
0	367,8	365,3	358,3	348,2	339,1	344,7
$\pi/10$	367,8	366,1	361,3	355,2	352,0	366,7
$2\pi/10$	367,8	368,1	369,1	372,6	383,4	415,9
$3\pi/10$	367,8	370,4	378,4	392,7	416,8	462,0
$4\pi/10$	367,8	372,3	385,8	407,9	439,6	488,4
$5\pi/10$	367,8	373,1	388,5	413,4	447,4	496,1

Видно, що зі збільшенням кута α максимальний прогин (в перерізі $\theta = \pi/2$) збільшується порівняно з прямою циліндричною оболонкою в 1,01; 1,06; 1,12; 1,22; 1,35 разів. Різниця між значеннями прогину в цих перерізах $\theta = 0$ і $\theta = \pi/2$ становить 2%, 8%, 16%, 24%, 31% для п'яти значень кута α відповідно.

В табл.2 наведено розподіли прогину wE/q в перерізі $\eta = \pi$ для різних значеннях кута $\alpha \in \{0^\circ, 10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 50^\circ\}$.

Видно, що зі збільшенням кута α максимальний прогин (в перерізі $z = 12$) збільшується, а мінімальний (в перерізі $z = 54$) – зменшується. Різниця між прогинами в цих перерізах для прямої циліндричної оболонки і оболонки з косими зрізами для різних значень кута $\alpha \in \{10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 50^\circ\}$ становить 4,4%, 9,1%, 15,5%, 25,5%, 41,3% і 4,9%, 10,1%, 15,9%, 22,3%, 29% відповідно.

Наведені результати ілюструють ефективність даного підходу і дозволяють проводити багатоваріантні числові експерименти з метою вибору раціональних параметрів циліндричних оболонок з косими зрізами.

Таблиця 2. Розподіл прогинів wE/q в перерізі $\eta = \pi$

α	0°	10°	20°	30°	40°	50°
0	0	0	0	0	0	0
6	313,1	328,1	344,4	363,9	387,8	413,7
12	382,5	399,3	417,4	441,7	480,2	540,6
18	368,8	377,5	384,3	393,3	414,6	468,8
24	367,3	370,1	368,9	366,0	368,3	396,7
30	367,8	365,3	358,3	348,2	339,1	344,7
36	367,3	359,9	347,8	332,2	315,9	306,8
42	368,8	356,5	340,2	320,3	298,8	280,5
48	382,5	364,5	344,0	320,6	295,1	270,1
54	313,1	297,9	281,6	263,4	243,4	222,2
60	0	0	0	0	0	0

Література

1. Григоренко Я.М., Крюков Н.Н. Решение задач теории пластин и оболочек с применением сплайн-функций (обзор)//Прикл. механика. – 1995. – 31, № 6. – С.3–27.
2. Григоренко Я.М., Крюков Н.Н. Численное решение задач статики гибких слоистых оболочек с переменными параметрами. – К.: Наук. думка, 1998. – 264 с.
3. Григоренко Я.М., Шевченко Ю.Н., ..., Крюков Н.Н. и др. Численные методы. – К.: «А.С.К», 2002. – 448с. – (Механика композитов: в 12-ти т., Т. 11).
4. Крюков Н.Н. Расчет косоугольных и трапециoidalных пластин с помощью сплайн-функций //Прикл. механика. – 1997. – 33, № 5. – С.3–27.
5. Варвак П.М., Рябов А.Ф. Справочник по теории упругости (для инженеров-строителей) – К: Будівельник, 1971. – 418с.
6. Рвачов В.Л., Курца Л.В. R-функции в задачах теории пластин. – К: Наука. думка, 1987. – 176с.
7. Завьялов Ю.С., Квасов Ю.И., Миропиниченко В.М. Методы сплайн-функций. – Москва: Наука, 1980. – 352с.
8. Тимошенко С.П., Войновский-Кригер С.А. Пластины и оболочки. – М: Наука, 1963. – 636с.
9. Корнишин М.С., Паймушин В.Н., Снягирев В.Ф. Вычислительная геометрия в задачах механики оболочек. – М.: Казань, 1989. – 208с.

Надійшла до редакції 10.02.2006

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 517.929

Олексій Бичков
Михайло Меркур'єв

Alexei Bychkov
Mikhailo Merkuriev

Існування та єдиність розв'язків
нечіткого диференціального рів-
няння

Existence and uniqueness of solution
of fuzzy differential equations

Сформульовано задачу Коші для
нечіткого диференціального рів-
няння. Доведено теорему про існу-
вання та єдиність розв'язку задачі
Коші.

Cauchy problem for fuzzy differential
equation is defined. Theorem of
existence and uniqueness of solution is
proved.

Ключові слова: Нечіткий процес,
нечітке диференціальне рівняння,
задача Коші, теорія можливостей

Keywords: Fuzzy process, fuzzy
differential equation, Cauchy problem,
theory of possibilities

Вступ.

Існуючі підходи до нечітких диференціальних рівнянь пов'язані з диференціальними рівняннями з нечіткими параметрами [1-5]. Недоліком цього підходу є те, що нечіткість моделює похибки в обчисленні параметрів та за основу усіх підходів береться перехід від нечітких до чітких методів аналізу систем. Новий підхід моделює еволюцію системи відразу за детермінованими та нечіткими законами. Для цього потрібно ввести новий клас інтегральних рівнянь.

Основний результат.

Означення 1 [6]. Можливісною шкалою називається півкільце $L = \{[0,1], \leq, +, \bullet\}$, тобто відрізок $[0,1]$ із звичайним порядком $\leq$ і двома операціями:

$$1. \quad a + b = \max\{a, b\};$$

$$2. \quad a \bullet b = \min\{a, b\}.$$

Нехай задана множина X та σ -алгебра $\mathcal{A} \subseteq \beta(X)$. Надалі будемо розглядати $\mathcal{A}$ -вимірні функції $f: X \rightarrow L$. Позначимо через $L(X)$ клас таких функцій, що виконуються наступні властивості:

1. $f \in L(X), a \in L \Rightarrow a \bullet f = \min(a, f(x)) \in L(X)$;
2. $f, g \in L(X) \Rightarrow f + g = \min(f(x), g(x)) \in L(X)$; $f \bullet g = \max(f(x), g(x)) \in L(X)$;
3. $f \in L(X) \Rightarrow -f \equiv 1 - f(x) \in L(X)$;

4. Якщо послідовність функцій $f_1, \dots, f_n, \dots \in L(X)$, то

$$\bigoplus_{n=1}^{\infty} f_n(x) \in L(X); \quad \bigodot_{n=1}^{\infty} f_n(x) \in L(X).$$

Для визначення можливісного простору необхідно ввести означення можливісної міри.

Означення 2 [6]. Функція $p: L(X) \rightarrow L$ із властивостями:

$$1. \quad p((a \bullet f)(\cdot) + (b \bullet g)(\cdot)) = (a \bullet p(f(\cdot))) + (b \bullet p(g(\cdot)));$$

$$2. \quad p\left(\bigoplus_{n=1}^{\infty} f_n(\cdot)\right) = \bigoplus_{n=1}^{\infty} p(f_n(\cdot));$$

3. Якщо $f(\cdot) \equiv 1$, то $p(f(\cdot)) = 1$,

називається можливісною мірою.

Означення 3 [6]. Визначимо функцію $P: \beta(X) \rightarrow L$ таким чином: $P(A) \equiv p(\chi_A(\cdot))$. Назвемо цю функцію можливістю чіткої події A . Тоді можливісним простором назвемо трійку $(X, \mathcal{A}, P)$.

Означення 4. Нехай задано можливісний простір $(X, \mathcal{A}, P)$ та вимірний простір $(Y, \mathcal{B})$. Нечіткою величиною назвемо $(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ -вимірну функцію $\xi: X \rightarrow Y$.

Означення 5 [6]. Нечіткі величини ξ та η зуться незалежними, якщо розподіл нечіткого вектора (ξ, η) дорівнює $\mu_{\xi, \eta}(u, v) = \min\{\mu_{\xi}(u), \mu_{\eta}(v)\}$.

Означення 6. Нечітку величину ξ (скалярну або векторну) назвемо нормальною, якщо її розподіл має вигляд $\mu_{\xi}(u) = \varphi\left\{\Xi^{-1/2}(u - u_0)\right\}^2$, де $\varphi(x)$ – монотонно спадна функція, що задана при $x \geq 0$ і така, що $\varphi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$, $\varphi(0) = 1$, а Ξ – додатно визначена матриця.

Означення 7. Нечітким процесом називається функція $\xi(x, t): X \times R \rightarrow Y$.

Означення 8. Нечіткий нормальний процес $w(t)$ називається процесом нечіткого блукання, якщо він:

1. З незалежними приростами, тобто для будь-яких моментів часу $t_1 < t_2 \leq t_3 < t_4$ нечіткі величини $w(t_2) - w(t_1)$ і $w(t_4) - w(t_3)$ незалежні.
2. При фіксованому t його перехідна можливість має вигляд

$$P\{w(t) = y \mid w(t_0) = y_0\} = \varphi\left(\frac{\|\Xi^{-1/2}(y - y_0)\|^2}{(t - t_0)^2}\right).$$

3. $w(0) = 0$.

Означення 9. Послідовність нечітких величин ξ_n збігається за можливістю до нечіткої величини ξ , якщо для будь-якого додатного c виконується $P\{|\xi_n - \xi| > c\} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$. Таку збіжність будемо позначати як $P \lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = \xi$.

Означення 10. Нехай задано кусково-постійну функцію $f: f(t) = \{y_k: t_k \leq t < t_{k+1}\}, k = 0 \dots N-1, t_0 = 0, t_N = T, w(t)$ – скалярний процес нечіткого блукання. Покладемо $\int_0^T f(t)dw(t) = \sum_{k=0}^{N-1} y_k(w(t_{k+1}) - w(t_k))$.

Лема 1. Нехай послідовність кусково-постійних функцій $f_n(t) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ у середньому. Тоді $P \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T f_n(t)dw(t) = 0$.

Доведення. За означенням збіжності в середньому маємо:

$$\begin{aligned} P\left\{\left|\int_0^T f_n(t)dw(t)\right| > c\right\} &= P\left\{\left|\sum_{k=0}^{N-1} f_k(w(t_{k+1}) - w(t_k))\right| > c\right\} \leq P\left\{\sum_{k=0}^N |f_k| \cdot |w(t_k) - w(t_{k+1})| \geq c\right\} = \\ &= \sup_{\substack{\alpha_0, \dots, \alpha_N \geq 0 \\ \sum_{k=0}^N |\alpha_k| \geq c}} P\{w(t_1) - w(t_0) = \alpha_0, \dots, w(t_N) - w(t_{N-1}) = \alpha_{N-1}\}, \end{aligned}$$

З незалежності приростів

$$\sup_{\substack{\alpha_0, \dots, \alpha_{N-1} \geq 0 \\ \sum_{k=0}^{N-1} |f_k| \alpha_k \geq c}} P\{w(t_1) - w(t_0) = \alpha_0, \dots, w(t_N) - w(t_{N-1}) = \alpha_{N-1}\} = \\ = \sup_{\substack{\alpha_0, \dots, \alpha_{N-1} \geq 0 \\ \sum_{k=0}^{N-1} |f_k| \alpha_k \geq c}} \min[P\{w(t_1) - w(t_0) = \alpha_0\}, \dots, P\{w(t_N) - w(t_{N-1}) = \alpha_{N-1}\}].$$

Позначимо $h(\alpha) = \min[P\{w(t_1) - w(t_0) = \alpha_0\}, \dots, P\{w(t_N) - w(t_{N-1}) = \alpha_{N-1}\}]$. Тоді

$$\sup_{\substack{\alpha_0, \dots, \alpha_{N-1} \geq 0 \\ \sum_{k=0}^{N-1} |f_k| \alpha_k \geq c}} \min[P\{w(t_1) - w(t_0) = \alpha_0\}, \dots, P\{w(t_N) - w(t_{N-1}) = \alpha_{N-1}\}] = \sup_{\substack{\alpha_0, \dots, \alpha_{N-1} \geq 0 \\ \sum_{k=0}^{N-1} |f_k| \alpha_k \geq c}} h(\alpha).$$

Візьмемо набір: $\bar{\alpha}_i = \frac{c(t_{i+1} - t_i)}{\int_0^T |f_n(t)| dt}$. Для цього набору виконується $\sum_{k=0}^{N-1} |f_k| \bar{\alpha}_k = c$.

$$P\{w(t_{i+1}) - w(t_i) = \bar{\alpha}_i\} = \varphi\left(\frac{\bar{\alpha}_i^2}{(t_{i+1} - t_i)^2}\right) = \varphi\left(\frac{c^2 (t_{i+1} - t_i)^2}{\left(\int_0^T |f_n(t)| dt\right)^2 (t_{i+1} - t_i)^2}\right) = \varphi\left(\frac{c^2}{\left(\int_0^T |f_n(t)| dt\right)^2}\right).$$

Таким чином, $h(\bar{\alpha}) = \min_i P\{w(t_{i+1}) - w(t_i) = \bar{\alpha}_i\} = \varphi\left(\frac{c^2}{\left(\int_0^T |f_n(t)| dt\right)^2}\right)$. Візьмемо інший набір

$\bar{\bar{\alpha}}_k$, для якого $\sum_{k=0}^{N-1} |f_k| \bar{\bar{\alpha}}_k \geq c$, не співпадаючий з $\bar{\alpha}$. Для деякого k $\bar{\bar{\alpha}}_k \geq \frac{c(t_{k+1} - t_k)}{\int_0^T |f_n(t)| dt}$, і з

спадання функції $\varphi(x)$ випливає, що

$$h(\bar{\bar{\alpha}}) \leq P\{w(t_{k+1}) - w(t_k) = \bar{\bar{\alpha}}_k\} < \varphi\left(\frac{c(t_{k+1} - t_k)}{\left(\int_0^T |f_n(t)| dt\right)^2}\right) = h(\bar{\alpha}).$$

Таким чином, ми показали, що верхня грань досягається на векторі $\bar{\alpha}$. Оскільки $\varphi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$, то

$P\left\{\left|\int_0^T f_n(t) dw(t)\right| > c\right\}$ збігається до 0 при $n \rightarrow \infty$. Таким чином, ми довели, що

$\int_0^T f_n(t) dw(t) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ за можливістю. Лему доведено.

Означення 11. Нехай ϵ кусково-неперервна функція $f(t)$ та до неї збігається в середньому послідовність кусково-постійних функцій $f_n(t)$. Тоді покладемо

$$\int_0^T f(t) dw(t) = \text{Plim}_{n \rightarrow \infty} \int_0^T f_n(t) dw(t).$$

Цей інтеграл назвемо інтегралом за процесом нечіткого блукання.

Розглянемо процес нечіткого блукання $w(t, x)$ та нечітку величину $y_0(x)$.
Запишемо таке інтегральне рівняння

$$y(t, x) = y_0(x) + \int_{t_0}^t a(y(s), s) ds + \int_{t_0}^t b(y(s), s) dw(s, x). \quad (1)$$

де останній інтеграл будемо розуміти як інтеграл за процесом нечіткого блукання [7].

Розв'язком рівняння (1) вважатимемо нечіткий процес $y(t) \equiv y(t, x)$, який при підстановці в (1) справджує це рівняння.

Поставимо для рівняння (1) початкову задачу:
знайти розв'язок рівняння (1) такий, що задовольняє умову

$$y(t_0, x) = y_0. \quad (2)$$

Отримаємо умови для існування розв'язку задачі (1),(2) та покажемо, що розв'язок буде єдиний.

Теорема 1. Якщо чіткі функції $a(y, t)$ та $b(y, t)$ неперервні та задовольняють умову Ліпшица на R , тобто

$$|a(y, t) - a(z, t)| \leq L|y - z|, \quad |b(y, t) - b(z, t)| \leq L|y - z| \text{ для будь-яких } y, z \in R$$

то для будь-якого нечіткого y_0 задача (1) має єдиний розв'язок на відрізку

$$t \in [t_0; t_0 + h], \text{ де } h \leq k \frac{1}{2L} \cdot \min \left\{ 1, \frac{1}{\sqrt{\varphi^{-1}(\alpha)}} \right\}, \quad k \in (0, 1). \text{ Під єдиністю розуміється таке:}$$

для будь-якого значення $x_0 \in X$, можливість якого не дорівнює нулю, для будь-яких двох розв'язків задачі $y(t, x_0, w(t))$ та $\bar{y}(t, x_0, w(t))$ $y(t, x_0, w(t)) = \bar{y}(t, x_0, w(t))$.

Доведення. Нехай зафіксоване $x_0 \in X$: $P(\{x_0\}) = \alpha > 0$. Від нього залежать траєкторія нечіткого процесу $w(t)$ та значення y_0 .

Доведемо, що для заданого x_0 , $y_0(x_0)$ існує єдиний розв'язок на відрізку $[t_0; t_0 + h]$. Розглянемо простір усіх неперервних функцій $f(t)$, $t \in [t_0; t_0 + h]$ таких, що $f(t_0) = y_0(x_0)$. На ньому визначимо відстань: $\rho(f, g) = \max_{t \in [t_0; t_0 + h]} |f(t) - g(t)|$.

$$\text{Розглянемо відображення: } \Phi(f(t)) = y_0(x_0) + \int_{t_0}^t a(f(s), s) ds + \int_{t_0}^t b(g(s), s) dw(s, x_0).$$

Покажемо, що воно стискаюче. З урахуванням умови Ліпшица одержуємо

$$\begin{aligned} \rho(\Phi(f), \Phi(g)) &= \max_{t \in [t_0; t_0 + h]} \left| \int_{t_0}^t (a(f(s), s) - a(g(s), s)) ds + \int_{t_0}^t (b(f(s), s) - b(g(s), s)) dw(s, x_0) \right| \leq \\ &\leq \max_{t \in [t_0; t_0 + h]} \left(\int_{t_0}^t |a(f(s), s) - a(g(s), s)| ds + \int_{t_0}^t |b(f(s), s) - b(g(s), s)| dw(s, x_0) \right) \leq \\ &\leq Lh \left(1 + \int_{t_0}^{t_0 + h} dw(s, x_0) \right) \rho(f, g) = Lh(1 + (w(t_0 + h, x_0) - w(t_0, x_0))) \rho(f, g). \end{aligned}$$

Оскільки $P(\{x\}) = \alpha$, то $w(t_0 + h, x_0) - w(t_0, x_0) \leq \sqrt{\varphi^{-1}(\alpha)} h$, де $\varphi(y): [0; +\infty) \rightarrow [0, 1]$ – функція, що відповідає розподілу можливостей процесу $w(t)$. Одержуємо:

$$\rho(\Phi(f), \Phi(g)) \leq Lh(1 + \sqrt{\varphi^{-1}(\alpha)} \cdot h) \cdot \rho(f, g) \leq 2L \cdot \max \{h, \sqrt{\varphi^{-1}(\alpha)} \cdot h\} \cdot \rho(f, g).$$

Таким чином, при $h \leq k \frac{1}{2L} \cdot \min \left\{ 1, \frac{1}{\sqrt[4]{\varphi^{-1}(\alpha)}} \right\}$, де $k \in (0,1)$, це відображення

стискаюче, і за принципом стискаючих відображень у нього існує нерухома точка. Як неважко бачити, будь-яка нерухома точка відображення Φ буде розв'язком задачі Коші для заданого x_0 .

Покажемо, що задача (1) на відрізку $(t_0; t_0 + h)$ має єдиний розв'язок. Дійсно, нехай на відрізку $(t_0; t_0 + h)$ є два розв'язки $y(t, x)$ та $\bar{y}(t, x)$, при цьому $y(t, x_0) \neq \bar{y}(t, x_0)$. Тоді маємо

$$y(t, x_0) = y_0(x_0) + \int_{t_0}^t a(y(s), s) ds + \int_{t_0}^t h(y(s), s) dw(s, x_0)$$

$$\bar{y}(t, x_0) = y_0(x_0) + \int_{t_0}^t a(\bar{y}(s), s) ds + \int_{t_0}^t b(\bar{y}(s), s) dw(s, x_0)$$

Віднявши від однієї рівності іншу, отримаємо

$$\begin{aligned} |y(t, x_0) - \bar{y}(t, x_0)| &= \left| \int_{t_0}^t [a(y(s), s) - a(\bar{y}(s), s)] ds + \int_{t_0}^t [h(y(s), s) - b(\bar{y}(s), s)] dw(s, x_0) \right| \leq \\ &\leq \int_{t_0}^t L |y(s) - \bar{y}(s)| ds + \int_{t_0}^t L |y(s) - \bar{y}(s)| dw(s, x_0). \end{aligned}$$

Оцінимо $\rho(y(\cdot, x_0), \bar{y}(\cdot, x_0))$.

$$\begin{aligned} \rho(y(\cdot, x_0), \bar{y}(\cdot, x_0)) &= \max_{t_0 \leq t \leq t_0 + h} |y(t, x_0) - \bar{y}(t, x_0)| \leq \\ &\leq \int_{t_0}^t L \cdot \rho(y(\cdot, x_0), \bar{y}(\cdot, x_0)) ds + \int_{t_0}^t L \cdot \rho(y(\cdot, x_0), \bar{y}(\cdot, x_0)) dw(s) \leq \\ &Lh \cdot \rho(y(\cdot, x_0), \bar{y}(\cdot, x_0)) + Lh^2 \sqrt{\varphi^{-1}(P(\{x_0\}))} \cdot \rho(y(\cdot, x_0), \bar{y}(\cdot, x_0)). \end{aligned}$$

З вибору h маємо $\rho(y(\cdot, x_0), \bar{y}(\cdot, x_0)) \leq k \cdot \rho(y(\cdot, x_0), \bar{y}(\cdot, x_0))$, що можливо лише коли $\rho(y(\cdot, x_0), \bar{y}(\cdot, x_0)) = 0$. Єдиність доведено.

ЛІТЕРАТУРА.

1. Park J. Yeoul, Han H. Keun Existence and uniqueness theorem for a solution of fuzzy differential equations // Internat.J.Math.&Math.Sci. Vol.22, No.2(1999).
2. Y.Friedmanan, U.Sandler, A new approach to fuzzy dynamics // Proc. of the 12th IAPR International Conference, Jerusalem, Israel(1994).
3. Kaleva O. The Cauchy problem for Fuzzy Differential equations // Fuzzy Sets and Systems, 35(1990).
4. Kloeden P.E. Fuzzy Dynamical Systems // Fuzzy Sets and Systems, 7 (1982).
5. Aubin J.-P. Fuzzy Differential Inclusions // Problems of Control and Information Theory, 19(1), 1990, p.55-67.
6. Пытьев Ю. П., Возможность. Элементы теории и применение. УРСС, М., 2000.- 190с.
7. О.Бичков Побудова інтегралу за процесом нечіткого блукання.// Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки, №4, 2005.

Надійшла до редакції 12.09.2005

УДК 519.9

Володимир А. Заславський*

Принцип різнотипності та особливості дослідження складних систем з високою ціною відмови

В статті сформульовано новий принцип прикладного системного аналізу – принцип різнотипності, який, при дослідженні складних систем з високою ціною відмови, дозволяє визначати комплекси взаємопов'язаних задач як суттєві усвідомлені проблеми.

Ключові слова: системний аналіз, принципи системного аналізу, принцип різнотипності.

Volodymyr A. Zaslavsky*

Types variety principle and peculiarities of complex systems research with the high value of failure

In this paper the new principle of applied system analysis – type variety principle – is formulated. It allows to recognize complex problems as vital realized problems in research of complex systems with high value of failure.

Key Words: system analysis, principles of system analysis, type variety principle.

*E-mail: zas@unicyb.kiev.ua

В сучасних умовах в Україні та інших країнах важливою науково-прикладною проблемою при створенні та забезпеченні стабільного функціонування складних систем з високою ціною відмови є розв'язання сукупності унікальних взаємопов'язаних задач, які виникають при дослідженні та забезпеченні працездатності систем на стадіях та етапах життєвого циклу, що вимагає розробки, з позицій системного підходу, нових загальних принципів, математичних моделей та алгоритмів для їх розв'язання та механізмів практичного впровадження [1].

Складні системи з високою ціною відмови – це складні багаторівневі ієрархічні системи:

- що розглядаються як цілісний об'єкт, який складається з функціонально різнотипних підсистем (елементів), що структурно взаємопов'язані ієрархічною підпорядкованістю, функціонально об'єднані в інтересах досягнення заданих цілей при певних умовах та ресурсних обмеженнях (при вирішенні функціональних задач) [2];

- є великомасштабними [3];

- вартість наслідків (збитків) від відмови (не функціонування) яких, або наслідки негативних подій, пов'язаних з ними, є глобальними, значними, або взагалі неусувними для країн, суспільства та навколишнього середовища;

- вартість розробки, створення та впровадження яких є значною (складає десятки, сотні мільйонів доларів США);

- які значно впливають на економіку країни, від них залежить ефективність функціонування промисловості, стабільність енергетичної системи і т.д.

Прикладами складних систем з високою ціною відмови, які мають стратегічне значення для країни, суттєво впливають на розвиток галузей народного господарства, життєдіяльність регіонів та підприємств, і є об'єктом дослідження, являються наступні системи: системи супутникового зв'язку та космічні апарати, стартові комплекси, територіально-розподілені системи забезпечення управління космічними апаратами, атомні електростанції (АЕС), платіжні системи (ПС) та корпоративні інформаційні системи, військові об'єкти, що утворюють систему національної безпеки, а також гідроспоруди, греблі, великі мости, нафтопереробні та хімічні підприємства, платформи по видобутку нафти на шельфі моря, нафто- та газопроводи, великовантажні танкери та інші. Їх несправність або відмова може призводити до катастрофічних наслідків. Такі системи класифікуються як унікальні об'єкти.

Поняття "висока ціна відмови" складних систем визначає відносну характеристику між цілями діяльності і засобами забезпечення, способами і результатами діяльності, пов'язаними із великомасштабними складними системами. Термін "ціна" в понятті "висока ціна відмови" характеризує визначення порядку між характеристиками та властивостями об'єктів, що розглядаються, і дозволяє відрізнити такий опис від опису сукупності інших властивостей об'єкту. Іншими словами, вносить класифікаційну впорядкованість для об'єктів. Конкретний зміст даного поняття визначає проблеми, що можуть стати причиною негативних наслідків при функціонуванні таких систем.

Характерною особливістю систем з високою ціною відмови є неспіврозмірність втрат, що можуть бути спричинені відмовою систем, в порівнянні з ефектом від їх нормального функціонування. Тому забезпечення безвідмовного функціонування таких систем є критичним в умовах жорстко обмежених ресурсів.

Актуальність та особливості дослідження складних систем з високою ціною відмови пов'язані з:

- протиріччями між існуючими на теперішній час значеннями техніко-економічних показників, що характеризують стан систем та елементів, і підвищеними вимогами до їх безвідмовного функціонування;
- необхідністю збільшення матеріальних витрат на забезпечення безвідмовності та високого рівня технічного стану після довготривалої експлуатації систем і відсутністю можливостей фінансового забезпечення у зв'язку зі складним економічним станом підприємств, обмеженими можливостями своєчасного здійснення технічного переобладнання систем, фактичним розривом науково-технічних зв'язків із підприємствами-

суміжниками, неякісним менеджментом та відсутністю необхідного досвіду експлуатації;

- зростанням відповідальності при прийнятті високовартісних рішень з метою забезпечення якості реалізації операцій на стадіях та етапах життєвого циклу систем та забезпечення ефективності їх функціонування;

- необхідністю розробки нових науково обґрунтованих методів як на етапі створення сучасних складних систем з високою ціною відмови, так і на етапі експлуатації, супроводження та підтримки безвідмовного функціонування існуючих об'єктів, які старіють та вичерпують свій технічний ресурс, а також при плануванні процесів ремонту та технічного обслуговування, що дозволяє забезпечувати необхідний рівень системної безпеки.

Створення складних технічних систем з високою ціною відмови в аерокосмічній галузі, дослідження та покращення існуючого стану об'єктів атомної промисловості, різних територіально-розподілених інформаційних та організаційних систем в умовах обмежених ресурсів неможливе без проведення системних досліджень, впровадження якісно нового менеджменту та практичних ініціатив для виявлення джерел небезпек та подолання негативних процесів, реалізація яких призводить до аварій на виробництвах (наприклад, через старіння основних виробничих фондів), екологічних катастроф, великих збитків для підприємств та суспільства.

Суттєве підвищення надійності та безпеки, збільшення тривалості термінів експлуатації (активного існування) систем з високою ціною відмови стає можливим за рахунок впровадження системного підходу при їх дослідженні, а також прийнятті відповідальних рішень при реалізації взаємопов'язаних процесів "проектування – випробування – експлуатація", тобто на всіх стадіях їх життєвого циклу.

Необхідність подальшого використання систем після довготривалої експлуатації, підтримки їх працездатності і належного рівня безпеки, неможливість своєчасної заміни унікальних та високовартісних елементів вимагають проведення різносторонніх досліджень їх технічного стану, а також виявлення можливих організаційних та технічних резервів. Метою таких досліджень є удосконалення усталених та розробка нових підходів при експлуатації систем: аналізу причин відмов елементів, появи дефектів та джерел небезпек, виявлення дефектів, планування своєчасного проведення заходів по продовженню технічного ресурсу.

Наприклад, проблема 2000-го року для комп'ютерних систем типу IBM/360 поставила задачі реінженірингу програмного коду в урядових корпоративних системах багатьох країн, інформаційних системах соціального забезпечення, та, особливо, в системах з високою ціною відмови. На сучасному етапі, заміна старіючого апаратного забезпечення (серверів) великих компаній та банківського сектору і, водночас, необхідність збереження функціонуючого програмного забезпечення.

вартість якого становить мільярди доларів, підкреслюють актуальність проблем оптимального використання та оновлення ресурсів інформаційних систем та систем підтримки прийняття рішень – сучасних платформ корпоративного управління [4].

Таки чином, предметом дослідження та аналізу є принципи системного аналізу, моделі та методи прийняття рішень, які використовуються при забезпеченні працездатності (живучості, життєздатності) систем з високою ціною відмови на всіх стадіях їх життєвого циклу. Одним з показників працездатності систем є надійність – імовірність безвідмовного функціонування системи протягом певного часу (наприклад, термін активного існування КА) у певному середовищі.

Принципи системного аналізу та принцип різнотипності. Поняття "системний аналіз", "системний підхід", "прикладний системний аналіз" та "системне мислення" пов'язані з бурхливим розвитком науково-технічного прогресу в двадцятому столітті [2-10], розвитком системних понять та системного підходу [2-18] і практичної реалізації системних досліджень [13, 16, 18-30].

Методологія системного підходу при дослідженні складних систем на практиці передбачає виконання наступної послідовності дій [5-8, 9, 13, 15, 16, 19-22]: формулювання задачі дослідження та критеріїв оцінки; виділення об'єкта дослідження, як системи, із навколишнього середовища; визначення внутрішньої структури системи; виявлення внутрішніх та зовнішніх зв'язків; визначення цілей компонентів, виходячи з цілей (очікуваних результатів) функціонування системи в цілому; розробка моделей системи та проведення їх досліджень; розробка алгоритмів оптимізації моделей.

Представлена вище послідовність дій складає основу системного підходу при дослідженні складних систем і дає наступне його формулювання: **системний підхід** – це підхід до дослідження об'єкта (проблеми, явища, процесу), як до системи, в якій виділені компоненти, найбільш суттєві внутрішні та зовнішні зв'язки, що впливають на результати її функціонування, а цілі кожного компонента визначаються із загальної цілі системи.

Розвиток системного аналізу, поетапне становлення та впровадження системних досліджень, узагальнення досвіду науковців та конструкторів при проектуванні та дослідженні систем різної складності, дозволили визначати не тільки кількісні характеристики рішень, а й сформулювати особливий метод системного мислення для збільшення ступеню розуміння проблем, позицію системного аналітика: при дослідженні складних систем, представляти внутрішні і зовнішні фактори як інтегроване ціле, гнучко реагувати на зміну обставин, приймати обґрунтовані узгоджені рішення та інтерпретувати їх [2, 8, 9, 13, 15, 16, 20, 31].

При формалізації та розв'язанні задач, що виникають при дослідженні складних систем, важливе значення мають положення, які прийнято називати **принципами системного підходу** – твердження загального характеру, закони явищ, що виникли при спостереженні, дослідженні та розв'язанні складних системних задач, які і узагальнюють досвід людини, що приймає рішення (ЛПР), при дослідженні, типізації, декомпозиції, процедурах аналізу і синтезу складних систем [2, 5, 6, 9, 13, 15, 18-25]. Їх використання, як системного інструментарію, дозволяє зробити складні системні задачі (системного аналізу та системного синтезу) принципово розв'язуваними, зокрема для задач з високим рівнем невизначеності (наприклад, задачі концептуального проектування) при недостатньому початковому обсязі даних та знань, дозволяє одержати інструментарій для генерації знань, синтезу та аналізу технічних рішень. Істинність принципів підтверджується фактами та досвідом. Їх використання як системного інструментарію при дослідженні конкретних систем дозволяє отримуються нові результати та висновки шляхом логіко-математичних міркувань, побудови моделей та алгоритмів.

Системний підхід та системне мислення базуються на систематичному використанні наступних принципів [2, 5, 9, 13, 18, 21]: *системності, оптимальності, ємерджентності (принцип Ешбі), глобальної мети, інтеграції, зв'язності, модульності, ієрархії, функціональності, ізоморфізму, формалізації, розвитку, розподіленості, децентралізації та принципу невизначеності.*

Вказані принципи є основними і дозволяють поєднувати природні та технічні знання. Вони враховуються і застосовуються при системному узгодженні рішень на етапах ЖЦ складних систем.

При дослідженні складних систем та створенні програмних комплексів важливими є наступні принципи [2, 15]: *системної узгодженості, процедурної повноти, функціональної ортогональності, інформаційної взаємозалежності, цілеспрямованої відповідності, функціональної раціональності, багатоцільової загальності, багатофакторної адаптивності, процедурної відкритості, раціонального доповнення, принципу економічності.*

Важливими в системних дослідженнях є також принципи: *повноважності, організованості (координованості), "чутливості", згортки (агрегації),* які використовуються при побудові систем організаційного управління, обробці інформації і т.д. При створенні розподілених систем підтримки прийняття рішень для виробничих систем важливими є принципи: *цілісності, системності, незалежності та розподіленості, координованості* [32].

Приведені принципи мають досить високий рівень абстракції, є рекомендаціями якісного характеру при розгляді об'єктів. Їх інтерпретація

та конкретизація здійснюється з урахуванням специфіки систем, що досліджуються (створюються або знаходяться в експлуатації).

Таким чином, під системним підходом можна також розуміти сукупність системних принципів, застосування яких приводить до глибшого розуміння та проникнення в суть проблеми, більшої точності та чіткого формулювання цілей та задач, можливості аналізу та порівняння результатів.

Разом з тим, аналіз наукових публікацій показує, що на сучасному етапі розвитку системних досліджень системні принципи не повністю розкриті і не достатньо розвинуті для поширеного практичного використання. Проведені теоретичні та прикладні дослідження унікальних складних систем з високою ціною відмови на різних стадіях та етапах їх життєвого циклу, узагальнення досвіду при забезпеченні ефективного функціонування територіально-розподілених систем, аналіз існуючих концепцій в літературних джерелах та використання відомих принципів системного аналізу, дозволили сформулювати **принцип різнотипності**, як новий принцип системного аналізу.

Визначення. *Принцип різнотипності* – це цілеспрямоване систематичне одночасне використання різних по своїй природі (принципу дії) компонентів (систем, елементів, технологій виготовлення, сировини різного походження, тощо), що виконують однакові функції, і кожен з яких може вирішувати проблему, але їх сполучення та взаємодія ефективно призводить до досягнення глобальної мети в системних дослідженнях.

Виникнення та формулювання принципу різнотипності безпосередньо пов'язане із розв'язанням прикладної проблеми підвищення вимог до якості проектних рішень при створенні високонадійних аерокосмічних систем, що привело до розвитку теорії і практики "різнотипного резервування" – підходу, за яким при проектуванні систем використовуються елементи різного типу, які різні за принципом побудови та дії, але виконують однакові функції. На необхідність розвитку різнотипного резервування наголошувалось в роботі [33]. Зазначений підхід дозволив принципово по-іншому формувати проектні рішення (розглядати всі можливі варіанти, які раніше не опрацьовувались), розробити математичні моделі та оптимізаційні алгоритми, які дозволили досягти необхідного рівня надійності з урахуванням існуючих вимог по техніко-економічним характеристикам [34-37].

На необхідність використання різнотипних методів неруйнівного контролю для актуальних задач виявлення дефектів наголошувалось в [38, 39] і принцип різнотипності було покладено в основу формування моделей вибору оптимального комплексу методів неруйнівного контролю при виявленні дефектів в системах з високою ціною відмови (стартові комплекси та АЕС) [40, 41]. Цей принцип знайшов своє застосування

також при формуванні різнопланових методик моніторингу банків, як складових ПС [42], розробці моделей та алгоритмів виявлення шахрайських транзакцій в ПС, формалізації моделей побудови очисних споруд в басейні річки [43] та інших дослідженнях.

Одним із проявів сутності принципу різнотипності в системному аналізі є можливість виділення (постановки) за його допомогою комплексу задач, які можуть визначатись як усвідомлена проблема.

Змістовно принцип різнотипності вказує на необхідність розглядати проблему з принципово різних точок зору, шукати різні грані, різнотипні специфічні властивості та ознаки, які впливають на ефективність дослідження. Принцип різнотипності задає механізми для забезпечення працездатності систем та ефективності розв'язання проблем в різних галузях діяльності.

Даний принцип узгоджується з відомим принципом різноманітності в живій природі [44], принципом оптимальності та інтеграції, принципом системності та емерджентності [5, 9]. Принцип емерджентності вказує на необхідність для досягнення глобальних результатів дослідженні систем та прийнятті рішень використовувати не тільки данні аналізу, але і дані синтезу. В [5] Ешбі відмічає задачі вибору на ранніх стадіях проектування, коли приймається рішення про те, якими повинні бути компоненти машин: електронними чи гідравлічними. Але питання про їх одночасне сумісне використання, тобто поєднання, як це розуміється в принципі різнотипності, не розглядається. Таким чином, принцип різнотипності підкреслює необхідність систематичного використання при дослідженні проблем принципово різних приладів, технологій, моделей, методів та даних для досягнення цілей і, таким чином, цілеспрямованої генерації різноманітності (числа різних елементів множини). Використання принципу різнотипності, так само, як і принципу емерджентності, дає синергетичний ефект.

Актуальність принципу різнотипності в системному аналізі розкривається його міждисциплінарністю, він може застосовуватись в різних сферах:

- в технічній сфері: застосування різнотипних (різних по принципу дії) підсистем та елементів обладнання в конструкціях систем (насос для подачі води в парогенератор має електро- і турбопривід і, у випадку виникнення події – повне відключення енергопостачання, використовується обладнання, для роботи якого не потрібне енергоживлення), використання аналогічних виробів від різних виробників, активні та пасивні заходи запобігання та тушіння пожеж, побудова різнотипних систем захисту для систем з високою ціною відмови [45–47], планування технічного обслуговування систем [48, 49], різнотипні системи автопілоту, різні методи моніторингу та алгоритми прийняття рішень при розв'язанні задач, використання різнотипних даних та ознак

об'єктів в задачах класифікації, резервовані системи збереження інформації (в банківських, інформаційних системах, ПС);

- в економічній сфері: різнотипний портфель інвестицій, різнотипні методи моніторингу підприємств, банків; аналіз різнотипних сценаріїв економічного розвитку галузей народного господарства (наприклад сценаріїв економічного розвитку України в залежності від характеристик наслідків ратифікації Україною Кіотського протоколу та можливі вигоди та збитки від реалізації інтегрованих механізмів управління при вирішенні еколого-економічних проблем, стратегічному плануванні перспективних розробок);

- при аналізі "що-якщо" сценаріїв в військовій сфері (мирний час, різноманітна гуманітарна допомога, театр бойових дій) [50];

- при формуванні та прийнятті відповідальних рішень, що мають "високу вартість", врахування принципу різнотипності дозволяє створювати інтелектуально-інформаційну базу прийняття рішень, що містить різнотипну інформацію та дані, різні моделі та методи прийняття рішень із залученням експертів з різних галузей [47, 51];

- в медицині принцип різнотипності (анестезія+гіпноз) використовується при проведенні хірургічних операцій в Університеті Айова (США). При використанні тільки анестезії післяопераційні ризики є значними, підбір препаратів та їх дозування вимагають особливої уваги, неправильний підбір препаратів та доз призводить до великої кількості фатальних випадків. Проведення операцій під гіпнозом вимагає високого класу спеціалістів та часу на підготовку. Комбінації доз анестезії (препаратів що посилюють гіпноз) та гіпнозу дають значно кращий позитивний (синергетичний) ефект, суттєво зменшують кількість фатальних випадків, дають значну економію ресурсів при проведенні операцій;

- у сфері освіти, наприклад, вивчення декількох мов програмування, використання різних алгоритмів у лінгвістиці і т.д.

Вказані застосування підкреслюють актуальність даного принципу і дозволяють зробити висновок, що в системному аналізі принцип різнотипності може розглядатись як міждисциплінарний принцип, який практично застосовується при вирішенні конкретних задач.

Принцип різнотипності є методологічною основою для формування нових методів аналізу і розгляду проблем за рахунок побудови комбінованих (різнотипних) варіантів підходів, моделей, сценаріїв, методик, алгоритмів та механізмів формування та прийняття відповідальних рішень та резервних варіантів рішень, тобто передбачає модельно-алгоритмічний підхід, який необхідний у стратегічному менеджменті [46, 47].

Специфіка, особливості, унікальність систем з високою ціною відмови вимагає проведення міжгалузевих досліджень та глибокого

розуміння шляхів (сценаріїв) розвитку процесів, що пов'язані з ними; джерел ризиків, які виникають при реалізації прийнятих рішень; необхідних обсягів ресурсів, тощо, та ставить питання про відповідальність за формування, прийняття та реалізацію стратегічних рішень (адміністративних, технічних, військових і т.д.) [52]. При цьому, як необхідність, виникає задача формування груп експертів з різних галузей знань, можливо із залученням іноземних експертів, які мають досвід при дослідженні проблем.

Таким чином, застосовується принципу різнотипності є важливою складовою частиною системної методології при дослідженні систем з високою ціною відмови, зокрема в сфері прийняття стратегічних та відповідальних рішень при вирішенні проблеми забезпечення їх безвідмовного функціонування на стадіях та етапах життєвого циклу.

Цілеспрямована консолідація різнопланових даних, факторів та сценаріїв, агрегація даних на рівнях ієрархії є складовою міждисциплінарних досліджень і принцип різнотипності в цій ситуації є тією методологічною основою, яка обґрунтовує необхідність пошуку додаткової інформації, залучення експертів різного профілю [46, 47].

За умов обмежених ресурсів та часу для підготовки та реалізації рішень, відповідальність органів управління перед країною, галуззю, регіоном за помилки, неврахування важливих факторів або можливих сценаріїв розвитку, невиявлення джерел ризику, невикористання або відсутність інформації в процесі формування стратегічних експертних рішень для критичної інфраструктури, що можуть призводити до катастрофічних наслідків, важко переоцінити [45, 46]. Якість рішень повинна оцінюватись за певними критеріями, що враховують можливі збитки при реалізації сценаріїв [2, 53, 54].

Висновки. Принцип різнотипності, як новий принцип системного аналізу, має своє визначення та тлумачення, є важливим при дослідженні складних систем з високою ціною відмови на всіх стадіях та етапах життєвого циклу. Він є міждисциплінарним, вказує на необхідність різностороннього дослідження проблем з одночасним використанням інших принципів системного аналізу, має синергетичну властивість, та за його допомогою представляється реально можливим вирішувати проблеми оптимальним чином.

Література

1. Заславський В.А. Дослідження складних систем з високою ціною відмови //Матеріали 12-ї Міжнар. конф. з автоматичного керування "Автоматика-2005".- Т.1.- Харків: НТУ"ХПІ".- 2005.- С. 16-17.
2. Згуровский М.З., Панкратова Н.Д. Системный анализ. Проблемы, методология, приложения.- К.: Наук. думка, 2005.- 744 с.

3. Месарович М., Мано Д., Такахара И. Теория иерархических многоуровневых систем.- М.: Мир, 1973.- 344 с.
4. Гейтс Б. Бизнес со скоростью мысли. Изд. 2-е, исправленное.- М.: Эксмо, 2003.- 480 с.
5. Эшби У.Р. Введение в кибернетику. М.:Изд-во иностр. лит-ры.- 1959.- 430 с.
6. Бусленко Н.П., Калашников В.В., Коваленко И.Н. Лекции по теории сложных систем.- М.: Сов. радио, 1973.- 440 с.
7. Моисеев Н.Н. Математические задачи системного анализа.- М.: Наука, 1981.- 488 с.
8. Исследование операций: В 2 т. /Под ред. Дж. Моудера, С. Элмаграби.- М.: Мир, 1981.- Т.1: Методологические основы и математические методы.- 712 с.
9. Спицнадель В.Н. Основы системного анализа. Учебное пособие.- Спб.: "Изд. дом "Бизнес пресса".-2000.-326 с.
10. Моисеев Н.Н. Избранные труды: В 2 т.- М.: Тайдекс Ко, 2003.- Т.1: Гидродинамика и механика. Оптимизация, исследование операций и теория управления.- 376 с.- Т.2: Междисциплинарные исследования глобальных проблем. Публицистика и общественные проблемы.- 264 с.
11. Вунш Г. Теория систем / Пер. с нем.- М.: Сов. радио, 1978.- 288 с.
12. Глушков В.М. Основы безбумажной информатики.- М: Наука, 1982.- 552с.
13. Губанов В.А., Захаров В.В, Коваленко А.Н. Введение в системный анализ: учебное пособие / Под ред. Л.А. Петросяна.- Л.: Издательство Ленинградского университета, 1988.-232 с.
14. Перегудов Ф.И., Тарасенко Ф.П. Введение в системный анализ.- М.: Высшая школа, 1989.- 367 с.
15. Клир Дж. Системология. Автоматизация решения системных задач: Пер. с англ.- М.: Радио и связь, 1990.- 544 с.
16. Саати Т., Кернс К. Аналитическое планирование. Организация систем.- М.: Радио и связь, 1991.
17. Цофнас А.Ю. Теория систем и теория познания.- Одесса: Астропринт, 1999.- 308 с.
18. Демідов Б.О., Величко О.Ф., Волощук І.В. Системно-концептуальні основи діяльності у військово-технічній сфері. Книга 1. Концептуальні основи та елементи національної безпеки /Під ред. Б.О.Демідова.- К.: 2004.- 736 с.
19. Калинин В.Н., Резников Б.А. Теория систем и управления структурно-математический подход.- Л., 1978.
20. Кини Р.Л., Райфа Х. Принятие решений при многих критериях: предпочтения и замещения.- М.: Радио и связь, 1981.- 580 с.
21. Михалевич В.С., Волкович В.Л. Вычислительные методы исследования и проектирования сложных систем.- М.: Наука, 1982.- 286 с.

22. Акофф Р. Планирование будущего корпораций.- М.: Прогресс, 1985.
23. Кунцевич В.М., Личак М.М. Синтез оптимальных и адаптивных систем управления. Игровой подход.- К.: Наук. думка, 1985.- 248 с.
24. Математические модели и оптимизационные методы геометрического проектирования / Стоян Ю.Г., Яковлев С.В.- К.: Наук. думка, 1986.- 268 с.
25. Методы анализа и синтеза структур управляющих систем / Волик Б.Г., Буянов Б.Б., Лубков Н.В. и др. / Под ред. Б.Г.Волика.-М.: Энергоатомиздат, 1988.- 296 с.
26. Павлов В.В., Обухов В.Е. Логические уравнения и прикладные задачи.- К.: Наук. думка.- 1992.- 185 с.
27. Якокка Л. Карьера менеджера.-М.: Мир, 1995.- 386 с.
28. Палагин А.В. Концепция системной интеграции в инновационных стратегиях // Управляющие системы и машины.- 2001.- № 2.- С.6-9.
29. Скопецкий В.В., Марченко О.А., Лежнина Н.А. Системный анализ объектов, находящихся под влиянием взаимодействующих процессов //Кибернетика и системный анализ.- 2001. - № 6.-С.54-66.
30. Сергієнко І.В. Про основні напрями створення інтелектуальних інформаційних технологій //Системні дослідження та інформаційні технології.- 2002.- № 1.- С.39-64.
31. Заславский В.А. Кто ты, системный аналитик? //ИТ-Менеджер.-2004.- №2.- С.55-57.
- 32 Весселс Я., Волкович В.Л. Проблемы распределенных систем поддержки принятия решений для сложных производственных систем // Проблемы управления и информатики.- 1994.- №1-2.-С.59-92.
33. Ушаков И. А. Методы решения простейших задач оптимального резервирования при наличии ограничений.— М.: Сов. радио, 1969.— 175 с.
34. Волкович В.Л., Заславский В.А Алгоритм решения задачи оптимизации надежности сложной системы с использованием в подсистемах разнотипных резервных элементов //Кибернетика.- 1986.- №5.- С.54-61,81.
35. Модели и алгоритмы оптимизации надежности сложных систем /В.Л.Волкович, А.Ф.Волошин, В.А.Заславский, И.А.Ушаков /Под ред. В.С.Михалевича.- К.: Наук. думка, 1992.- 312 с.
36. Проектирование надежных спутников связи. Афанасьев В.Г., Верхотуров В.И., Заславский В.А. и др. /Под ред. ак. М.Ф.Решетнева.- Томск: МГП "РАСКО", 1993.- 221с.
37. Заславский В.А. Расчет и оптимизация надежности систем "k из n"/ Thesis of conference reports. Int. Conf. Modeling and Investigation of Systems Stability.- Kiev, 1997.- С.44.
38. Гетьман А.Ф., Козин Ю.Н. Неразрушающий контроль и безопасность эксплуатации сосудов и трубопроводов давления.- М.: Энергоатомиздат, 1997.- 288 с.

39. Зубарєв В.В., Ленков С.В., Мокрицький В.А., Перегудов Д.О. Вплив дефектів функціональних матеріалів на надійність електроніки /Під ред. С.В.Ленкова.- Одеса: "ДРУК", 2003.- 452 с.
40. Заславский В.А., Каденко И.Н. Роль и место методов неразрушающего контроля для обеспечения надежности и долговечности сложных систем с высокой ценой отказа.- Информационно рекламный бюллетень "Неразрушающий контроль", №1, 1999, С.15-22.
41. Kadenko I., Sakhno N. Zaslavsky V. Application of the complex NDT approach for inspection of NPP power system /Proc. of Int. Symp. on Nondestructive Testing Contribution to the Infrastructure Safety Systems in the 21st Century.- Torres (Brazil), 1999.- P.4.
42. Заславський В.А. Мониторинг и анализ рисков в платежных системах //Соціальні ризики. - Т.2 / Відп. ред.: Ю.І.Сасенко, Ю.О.Привалов.- К.: ПЦ "Фоліант", 2004.-568с. С. 224-270.
43. Заславський В.А. Многоэтапная оптимизационная модель задачи водного менеджмента бассейна реки // Мир информационных технологий, 2005.- №2.-С.18-22.
44. Оноприенко Ю.И. Эволюционная биология. Системно-информационный подход.- Магадан: СВНИЦ ДВО РАН, 2003.- 230с.
45. Haimes Y. Y., Longstaff T. A. The Role of Risk Analysis in the Protection of Critical Infrastructures Against Terrorism/ Risk Analysis, Vol. 22, No. 3, 2002, p. 439-443.
46. Sagan S.D. The problem of redundancy problem: why more nuclear security forces may produce less nuclear security/ Risk Analyses.- 2004.-vol. 24, No. 4.- p.935-946.
47. Carroll J.S. Redundancy as a Design Principle and an Operating Principle/ Risk Analysis.- 2004.-Vol. 24, No. 4.-p. 955-957.
48. Зеленцов В.А., Гагин А.А. Надежность, живучесть и ТО сетей связи //МО.- 1991.
49. Модели технического обслуживания систем с избыточностью/ Б.П.Креденцер, С.В.Ленков С.В., М.И.Резников, В.В.Зубарєв /Под ред. Б.П.Креденцера.- К.: Фенікс, 2002.- 192 с.
50. Hawk J. Models address the complex problem of assigning intelligence, surveillance and reconnaissance resources // SIGNAL.- 2005.- October.-p.51-53.
51. Stiber N.A., Small M.J., Pantazidou M. Site-specific updating and aggregation of Bayesian belief network models for multiple experts/ Risk Analysis. -2004.-Vol. 24, No. 6, p.1529-1538. -
52. Kunreuther H. Risk analysis and risk management in an uncertain World/ Risk Analysis.-2002.- Vol. 22, No. 4.- p. 655-663.
53. Ermoliev Y. Uncertainties and decision making // IIASA, WP-93-22.- 1993.
54. Екологічна безпека України: системний аналіз перспектив покращення /А.Б. Качинський.- К: НІСД, 2001.- 312 с.

Надійшла до редакції 02.01.2006

УДК 517.929

Абат Т. Кожаметов, Денис Я.
Хусаїнов, Андрій В. Шатирко*

Abat T.Kozhametov, Denys Ya.
Khusainov, Andrey V. Shatyrko*

Керування до заданої функції Ляпунова в системах з запізненням

Control to Given Lyapunov Function in Systems with Delay

В статті одержано умови стабілізації систем з запізненням до заданого виду. Метод базується на побудові керування у вигляді оберненого зв'язку, при якому похідна функції Ляпунова задовольняє певній нерівності.

In this article the stabilization conditions of systems with delay to given form were got. The method is based on formation of control as feedback, where derivative of Lyapunov function satisfies some inequality.

Ключові слова: система, квадратична форма, запізнення, функція Ляпунова.

Key Words: system, quadratic form, delay, Lyapunov function.

*E-mail: Khusainov@stab.univ.kiev.ua

У більшості задач оптимізації динамічних систем керування вибирається або з метою мінімізації інтегрального критерію якості, або (для лінійних стаціонарних систем) досягнення заданого спектру [1,2]. В той же час досить непоганою оцінкою якості перехідних процесів у динамічних системах може служити наперед задана квадратична функція Ляпунова з експоненціальним показником збіжності. Вона гарантує задану величину перехідного процесу і показник згасання [3].

Будемо розглядати лінійні керовані стаціонарні системи диференціальних рівнянь з сталим запізненням

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + Bx(t - \tau) + bu(t), \quad t \geq 0. \quad (1)$$

Керування будемо шукати у вигляді лінійної комбінації фазових змінних у поточний момент часу й у попередній, тобто у вигляді

$$u(t) = c^T x(t) + d^T x(t - \tau).$$

В роботі знайдені умови, при виконанні яких розв'язок $x(t)$ замкненої системи з запізненням

$$\dot{x}(t) = (A + bc^T)x(t) + (B + bd^T)x(t - \tau), \quad t \geq 0 \quad (2)$$

експоненціально згасає з показником γ , де $\gamma > 0$ наперед задана величина.

Попередньо розглянемо лінійну стаціонарну систему диференціальних рівнянь з запізненням без керування

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + Bx(t - \tau), \quad t > 0, x(t) \in R^n, \tau > 0. \quad (3)$$

Нехай задана квадратична форма $V(x) = x^T H x$ з додатно визначеною матрицею H , і повна похідна функції $V(x)$ уздовж розв'язків $x(t)$ системи (3) задовольняє диференціальній нерівності

$$\dot{V}(x(t)) < -\gamma V(x(t)), \quad (4)$$

з додатною сталою $\gamma > 0$.

Визначення 1. Будемо говорити, що система (3) стійка до заданої функції Ляпунова $V(x)$ з показником $\gamma > 0$, якщо для повної похідної функції $V(x)$ в силу системи (3) виконується нерівність (4).

Визначення 2. Будемо говорити, що система (3) стабілізована до заданої функції Ляпунова з показником $\gamma > 0$, якщо знайдуться вектори c і d такі, що замкнена система буде стійкою до заданої функції Ляпунова з показником $\gamma > 0$.

Позначимо

$$C(\gamma) = -\left(A + B + \frac{1}{2}I\right)^T H - H\left(A + B + \frac{1}{2}I\right), \quad \varphi(H) = \lambda_{\max}(H) / \lambda_{\min}(H), \quad (5)$$

де I - одинична матриця, $\lambda_{\max}(\bullet)$, $\lambda_{\min}(\bullet)$ - максимальне і мінімальне власні числа відповідних матриць.

У роботі [3] отримано наступний результат.

Теорема 1. Нехай для заданих додатно визначеної матриці H і скаляра $\gamma > 0$ виконується нерівність

$$\lambda_{\min}[C(\gamma)] - 2|HB|(1 + \sqrt{\varphi(H)}) > 0. \quad (6)$$

Тоді при $t \geq \tau$ система (3) стійка до функції Ляпунова з показником $\gamma > 0$. І для її розв'язків $x(t)$ справедлива наступна оцінка збіжності

$$|x(t)| \leq \begin{cases} N(t)\sqrt{\varphi(H)}\|x(0)\|, & 0 \leq t \leq \tau, \\ N(\tau)\sqrt{\varphi(H)}\|x(0)\|e^{-\gamma t/2}, & t > \tau, \end{cases}$$

$$N(t) = \exp\left\{-\frac{1}{2\lambda_{\max}(H)}[\lambda_{\min}[C(\gamma)] - 2|HB|]t\right\} + \frac{2|HB|\sqrt{\varphi(H)}}{[\lambda_{\min}[C(\gamma)] - 2|HB|\sqrt{\lambda_{\min}(H)}]} \times \\ \times \left[1 - \exp\left\{-\frac{1}{2\lambda_{\max}(H)}[\lambda_{\min}[C(\gamma)] - 2|HB|]t\right\}\right].$$

Отримана також більш слабка умова стійкості з показником $\gamma > 0$. Для її виконання потрібна лише стійкість системи без запізнення. Але при цьому накладаються додаткові обмеження на величину запізнення τ . А саме $\tau < \tau_0$, де τ_0 - гарантоване запізнення, що залежить від параметрів системи і від матриці квадратичної функції Ляпунова.

Теорема 2. Нехай при заданій додатно визначеній матриці H і скалярі $\gamma > 0$ матриця $C(\gamma)$ (5) додатно визначена. Тоді при $\tau < \tau_0$, де

$$\tau_0 = \frac{\lambda_{\min}[C(\gamma)]}{2|HB|(|A| + |B|)\sqrt{\varphi(H)}}, \quad (7)$$

система (3) стійка до функції Ляпунова з показником $\gamma > 0$, і для її розв'язків справедлива експоненціальна оцінка збіжності

$$\|x(t)\| \leq \begin{cases} [e^{-\gamma t/2} + G(t)]\sqrt{\varphi(H)}\|x(0)\|, & 0 \leq t \leq \tau, \\ [e^{-\gamma t/2} + G(t)]\sqrt{\varphi(H)}\|x(0)\|, & t > \tau, \end{cases} \quad G(t) = \frac{2}{\gamma}|B|(1 - e^{-\gamma t/2}).$$

Розглянемо проблему стабілізації до заданої функції Ляпунова. Якщо керування брати у вигляді зворотного зв'язку лінійної комбінації фазової координати і її передісторії, то замкнена система буде мати вигляд (2). Нехай задана функція Ляпунова $V(x) = x^T Hx$ і показник $\gamma > 0$. Має місце наступне твердження.

Теорема 3. Нехай пара $(A + B, b)$ є керованою, тобто

$$\text{rank } S = n, \quad S = \{b, (A+B)b, (A+B)^2 b, \dots, (A+B)^{n-1} b\}. \quad (8)$$

Якщо існують вектори $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$, $d = (d_1, d_2, \dots, d_n)^T$, при яких нерівність

$$\lambda_{\min}[-\gamma H_1 - H_2 - \Delta_1(c, d)] - 2|H_1 B_1 + \Delta_2(d)|(1 + \sqrt{\varphi(H_1)}) > 0 \quad (9)$$

має розв'язок, то система з запізненням стабілізована до заданої функції Ляпунова $V(x) = x^T Hx$ з показником $\gamma > 0$, при довільному запізненні $\tau > 0$. Тут

$$\begin{aligned} H_1 &= S^T H S = \{h_{ij}^1\}, \quad B_1 = S^{-1} B S = \{b_j^1\}, \quad i, j = \overline{1, n}, \\ H_2 &= \{h_{ij}^2\}, \quad i, j = \overline{1, n}, \quad h_{ij}^2 = h_{i+1,j}^1 + h_{i,j+1}^1, \quad h_{i,n+1}^1 = -(h_i^1)^T p, \quad i = \overline{1, n}, \\ h_i^1 &= (h_{i1}^1, h_{i2}^1, \dots, h_{in}^1)^T, \quad p = (p_n, p_{n-1}, \dots, p_1)^T, \end{aligned} \quad (10)$$

p_i , $i = \overline{1, n}$ - коефіцієнти характеристичного рівняння матриці $A + B$,

$$c_i = S^T c = (c_1^1, c_2^1, \dots, c_n^1)^T, \quad d_i = S^T d = (d_1^1, d_2^1, \dots, d_n^1)^T.$$

Матриці $\Delta_1(c, d)$ и $\Delta_2(d)$ мають вигляд

$$\Delta_1(c, d) =$$

$$= \begin{bmatrix} 2(c_1^1 + d_1^1)h_{11}^1 & (c_1^1 + d_1^1)h_{12}^1 + (c_2^1 + d_2^1)h_{11}^1 & \dots & (c_1^1 + d_1^1)h_{1n}^1 + (c_n^1 + d_n^1)h_{11}^1 \\ (c_2^1 + d_2^1)h_{11}^1 + (c_1^1 + d_1^1)h_{12}^1 & 2(c_2^1 + d_2^1)h_{12}^1 & \dots & (c_2^1 + d_2^1)h_{1n}^1 + (c_n^1 + d_n^1)h_{12}^1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (c_n^1 + d_n^1)h_{11}^1 + (c_1^1 + d_1^1)h_{1n}^1 & (c_n^1 + d_n^1)h_{12}^1 + (c_2^1 + d_2^1)h_{1n}^1 & \dots & 2(c_n^1 + d_n^1)h_{1n}^1 \end{bmatrix}.$$

$$\Delta_2(d) = \begin{bmatrix} h_{11}^1 d_1^1 & h_{11}^1 d_2^1 & \dots & h_{11}^1 d_n^1 \\ h_{12}^1 d_1^1 & h_{12}^1 d_2^1 & \dots & h_{12}^1 d_n^1 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ h_{1n}^1 d_1^1 & h_{1n}^1 d_2^1 & \dots & h_{1n}^1 d_n^1 \end{bmatrix}.$$

Доведення. Перепишемо систему (2) у вигляді "збуреної" системи

$$\dot{x}(t) = [(A + B) + b(c + d)^T]x(t) + (B + bd^T)[x(t - \tau) - x(t)].$$

За умовою матриця S , що визначена в (8), є неособливою. Зробивши перетворення $x(t) = Sy(t)$, одержимо систему

$$y(t) = [A_1 + b_1(c_1 + d_1)^T]y(t) + (B_1 + b_1 d_1^T)[y(t - \tau) - y(t)],$$

де

$$A_1 = S^{-1}(A + B)S = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -p_n \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & -p_{n-1} \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & -p_{n-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -p_1 \end{bmatrix}, \quad b_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$B_1 = S^{-1}BS,$$

$p_i, i = \overline{1, n}$ - коефіцієнти характеристичного рівняння матриці $A + B$, тобто

$$\det\{\lambda I - (A + B)\} = \lambda^n + p_1 \lambda^{n-1} + \dots + p_{n-1} \lambda + p_n.$$

Позначимо

$$H_1 = S^T HS = \begin{bmatrix} h_{11}^1 & h_{12}^1 & \dots & h_{1n}^1 \\ h_{12}^1 & h_{22}^1 & \dots & h_{2n}^1 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ h_{1n}^1 & h_{2n}^1 & \dots & h_{nn}^1 \end{bmatrix}, \quad B_1 = \begin{bmatrix} b_{11}^1 & b_{12}^1 & \dots & b_{1n}^1 \\ b_{21}^1 & b_{22}^1 & \dots & b_{2n}^1 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ b_{n1}^1 & b_{n2}^1 & \dots & b_{nn}^1 \end{bmatrix}.$$

$$d_1 = S^T d = (d_1^1, d_2^1, \dots, d_n^1)^T, \quad c_1 = S^T c = (c_1^1, c_2^1, \dots, c_n^1)^T$$

Тоді, як випливає з теореми 1, для керованості до заданої функції Ляпунова достатньо виконання нерівності

$$\lambda_{\min}[C_1(\gamma, c, d)] - 2\|H_1(B_1 + b_1 d_1^T)(1 + \sqrt{\varphi(H_1)})\| > 0,$$

де

$$C_1(\gamma, c, d) = -\left[\left(A_1 + \frac{1}{2}\mathcal{H} + b_1(c + d_1)^T \right)^T H_1 + H_1 \left(A_1 + \frac{1}{2}\mathcal{H} + b_1(c + d_1)^T \right) \right].$$

Перепишемо матрицю $C_1(\gamma, c, d)$ таким чином

$$C_1(\gamma, c, d) = -\left[\left(A_1 + \frac{1}{2}\mathcal{H} \right)^T H_1 + H_1 \left(A_1 + \frac{1}{2}\mathcal{H} \right) \right] -$$

$$- \left[(b_i(c_i + d_i))^T H_i + H_i b_i(c_i + d_i)^T \right]$$

Використовуючи результати перетворень, проведених у [4], запишемо

$$\left(A_i + \frac{1}{2} \gamma I \right) = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \gamma h_{11}^i + h_{12}^i & \frac{1}{2} \gamma h_{12}^i + h_{22}^i & \dots & \frac{1}{2} \gamma h_{1n}^i + h_{2n}^i \\ \frac{1}{2} \gamma h_{12}^i + h_{13}^i & \frac{1}{2} \gamma h_{22}^i + h_{23}^i & \dots & \frac{1}{2} \gamma h_{2n}^i + h_{3n}^i \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{1}{2} \gamma h_{1,n-1}^i + h_{1n}^i & \frac{1}{2} \gamma h_{2,n-1}^i + h_{2n}^i & \dots & \frac{1}{2} \gamma h_{n-1,n}^i + h_{nn}^i \\ \frac{1}{2} \gamma h_{1,n}^i + h_{1,n+1}^i & \frac{1}{2} \gamma h_{2,n}^i + h_{2,n+1}^i & \dots & \frac{1}{2} \gamma h_{nn}^i + h_{n,n+1}^i \end{bmatrix},$$

де $h_{i,n+1}^i = -(h_i^i)^T p$, $p = (p_n, p_{n-1}, \dots, p_1)^T$, $h_i^i = (h_{i1}^i, h_{i2}^i, \dots, h_{in}^i)^T$, $i = \overline{1, n}$.

Склавши отриману матрицю з транспонованою до неї, перепишемо перший матричний доданок у вигляді

$$\left(A_i + \frac{1}{2} \gamma I \right)^T H_i + H_i \left(A_i + \frac{1}{2} \gamma I \right) =$$

$$= \begin{bmatrix} \gamma h_{11}^i + h_{12}^i + h_{21}^i & \gamma h_{12}^i + h_{13}^i + h_{22}^i & \dots & \gamma h_{1n}^i + h_{1,n+1}^i + h_{2n}^i \\ \gamma h_{21}^i + h_{22}^i + h_{31}^i & \gamma h_{22}^i + h_{23}^i + h_{32}^i & \dots & \gamma h_{2n}^i + h_{2,n+1}^i + h_{3n}^i \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \gamma h_{n-1,1}^i + h_{n-1,2}^i + h_{n1}^i & \gamma h_{n-1,2}^i + h_{n-1,3}^i + h_{n2}^i & \dots & \gamma h_{n-1,n}^i + h_{n-1,n+1}^i + h_{nn}^i \\ \gamma h_{n1}^i + h_{n2}^i + h_{n+1,1}^i & \gamma h_{n2}^i + h_{n3}^i + h_{n+1,2}^i & \dots & \gamma h_{nn}^i + h_{n,n+1}^i + h_{n+1,n}^i \end{bmatrix}$$

Введемо наступну матрицю

$$H_i = \{h_{ij}^i\}, \quad i, j = \overline{1, n}, \quad h_{ij}^i = h_{i+1,j}^i + h_{i,j+1}^i, \quad h_{i,n+1}^i = -(h_i^i)^T p, \quad i, j = \overline{1, n}.$$

Тоді перший матричний доданок можна переписати у вигляді

$$\left(A_i + \frac{1}{2} \gamma I \right)^T H_i + H_i \left(A_i + \frac{1}{2} \gamma I \right) = \gamma H_i + H_i.$$

Перетворимо другий матричний доданок таким чином

$$H_i b_i(c_i + d_i)^T =$$

$$= \begin{bmatrix} h_{11}^1 & h_{12}^1 & \dots & h_{1n}^1 \\ h_{12}^1 & h_{22}^1 & \dots & h_{2n}^1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{1n}^1 & h_{2n}^1 & \dots & h_{nn}^1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^1 + d_1^1 & c_2^1 + d_2^1 & \dots & c_n^1 + d_n^1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} (c_1^1 + d_1^1)h_{11}^1 & (c_2^1 + d_2^1)h_{11}^1 & \dots & (c_n^1 + d_n^1)h_{11}^1 \\ (c_1^1 + d_1^1)h_{12}^1 & (c_2^1 + d_2^1)h_{12}^1 & \dots & (c_n^1 + d_n^1)h_{12}^1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (c_1^1 + d_1^1)h_{1n}^1 & (c_2^1 + d_2^1)h_{1n}^1 & \dots & (c_n^1 + d_n^1)h_{1n}^1 \end{bmatrix}.$$

Склавши отриману матрицю з транспонованою до неї, одержимо

$$[b_1(c_1 + d_1)^T]^T H_1 + H_1 b_1(c_1 + d_1)^T = \Delta_1(c_1 d),$$

де

$$\Delta_1(c_1 d) =$$

$$= \begin{bmatrix} 2(c_1^1 + d_1^1)h_{11}^1 & (c_1^1 + d_1^1)h_{12}^1 + (c_2^1 + d_2^1)h_{11}^1 & \dots & (c_1^1 + d_1^1)h_{1n}^1 + (c_n^1 + d_n^1)h_{11}^1 \\ (c_2^1 + d_2^1)h_{11}^1 + (c_1^1 + d_1^1)h_{12}^1 & 2(c_2^1 + d_2^1)h_{12}^1 & \dots & (c_2^1 + d_2^1)h_{1n}^1 + (c_n^1 + d_n^1)h_{12}^1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (c_n^1 + d_n^1)h_{11}^1 + (c_1^1 + d_1^1)h_{1n}^1 & (c_n^1 + d_n^1)h_{12}^1 + (c_2^1 + d_2^1)h_{1n}^1 & \dots & 2(c_n^1 + d_n^1)h_{1n}^1 \end{bmatrix}$$

Таким чином одержимо, що

$$C_1(y, c, d) = -\gamma H_1 - H_2 - \Delta_1(c_1 d).$$

Розглянемо другий доданок нерівності (9). Він може бути записаним у вигляді

$$H_1(B_1 + b_1 d_1^T) = H_1 B_1 + (H_1 b_1) d_1^T = H_1 B_1 + \Delta_2(d),$$

де

$$\Delta_2(d) = \begin{bmatrix} h_{11}^1 d_1^1 & h_{11}^1 d_2^1 & \dots & h_{11}^1 d_n^1 \\ h_{12}^1 d_1^1 & h_{12}^1 d_2^1 & \dots & h_{12}^1 d_n^1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{1n}^1 d_1^1 & h_{1n}^1 d_2^1 & \dots & h_{1n}^1 d_n^1 \end{bmatrix}$$

Таким чином, після проведених перетворень нерівність (9) здобуває вигляд

$$\lambda_{\min} [\gamma H_1 + H_2 + \Delta_1(c, d)] - 2|H_1 B_1 + \Delta_2(d)|(1 + \sqrt{\varphi(H)}) > 0.$$

І, якщо знайдуться вектори c і d , при який вона буде виконуватися, то система буде стабілізована до заданої функції Ляпунова $V(x) = x^T H x$ з показником $\gamma > 0$.

У приведеній теоремі 3 отримані умови стабілізації до заданої функції Ляпунова $V(x) = x^T H x$ з показником $\gamma > 0$ для довільного запізнення $\tau > 0$. Розглянемо одержання умов стабілізації для малого, залежного від параметрів системи, запізнення $\tau < \tau_0$.

Теорема 4. Нехай пара $(A + B, b)$ є керованою, тобто виконуються умови (8). Якщо існують вектори $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$, $d = (d_1, d_2, \dots, d_n)^T$, при яких матриця

$$C_1(\gamma, c, d) = -\gamma H_1 - H_2 - \Delta_1(c, d)$$

буде додатно визначеною, то при $\tau < \tau_0$, де

$$\tau_0 = \frac{\lambda_{\min}[-\gamma H_1 - H_2 - \Delta_1(c, d)]}{2|S^T H (B + b d^T) S|(|S^{-1}(A + b c^T) S| + |S^{-1}(B + b d^T) S|)\sqrt{\varphi(H_1)}}, \quad (11)$$

система з запізненням є стабілізованою до заданої функції Ляпунова $V(x) = x^T H x$ з показником $\gamma > 0$.

Тут

$$H_1 = S^T H S = \{h_{ij}^1\}, \quad B_1 = S^{-1} B S = \{b_{ij}^1\}, \quad i, j = \overline{1, n};$$

$$H_2 = \{h_{ij}^2\}, \quad i, j = \overline{1, n}, \quad h_{ij}^2 = h_{i+1, j}^1 + h_{i, j+1}^1, \quad h_{i, n+1}^1 = -(h_i^1)^T p, \quad i = \overline{1, n},$$

$$h_i^1 = (h_{i1}^1, h_{i2}^1, \dots, h_{in}^1)^T, \quad p = (p_n, p_{n-1}, \dots, p_1)^T,$$

$p_i, i = \overline{1, n}$ - коефіцієнти характеристичного рівняння матриці $A + B$,

$$c_i = S^T c = (c_1^1, c_2^1, \dots, c_n^1)^T, \quad d_i = S^T d = (d_1^1, d_2^1, \dots, d_n^1)^T$$

$$\Delta_1(c, d) =$$

$$= \begin{bmatrix} 2(c_1^1 + d_1^1)h_{11}^1 & (c_1^1 + d_1^1)h_{12}^1 + (c_2^1 + d_2^1)h_{11}^1 & \dots & (c_1^1 + d_1^1)h_{1n}^1 + (c_n^1 + d_n^1)h_{11}^1 \\ (c_2^1 + d_2^1)h_{11}^1 + (c_1^1 + d_1^1)h_{12}^1 & 2(c_2^1 + d_2^1)h_{12}^1 & \dots & (c_2^1 + d_2^1)h_{1n}^1 + (c_n^1 + d_n^1)h_{12}^1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (c_n^1 + d_n^1)h_{11}^1 + (c_1^1 + d_1^1)h_{1n}^1 & (c_n^1 + d_n^1)h_{12}^1 + (c_2^1 + d_2^1)h_{1n}^1 & \dots & 2(c_n^1 + d_n^1)h_{1n}^1 \end{bmatrix}$$

Доведення. Зробимо невироджене перетворення

$$x(t) = S y(t)$$

Після цього система з запізненням прийме вигляд

$$\dot{y}(t) = S^{-1}(A + b c^T) S y(t) + S^{-1}(B + b d) S y(t - \tau). \quad (12)$$

Позначивши

$$A_2 = S^{-1}(A + b c^T) S, \quad B_2 = S^{-1}(B + b d) S,$$

одержимо

$$\dot{y}(t) = A_2 y(t) + B_2 y(t - \tau).$$

З врахуванням приведених раніше позначень перепишемо перетворену систему (12) у вигляді системи з "збуренням"

$$\dot{y}(t) = \left[A_1 + b_1(c_1 + d_1)^T \right] y(t) + \left(B_1 + b_1 d_1^T \right) [y(t - \tau) - y(t)] .$$

Як випливає з теореми 2, система буде стійкою до заданої функції Ляпунова $V(x) = x^T H x$ з показником $\gamma > 0$, якщо матриця

$$C_1(\gamma, c, d) = - \left[\left(A_1 + \frac{1}{2} \gamma I + b_1(c_1 + d_1)^T \right)^T + H_1 \left(A_1 + \frac{1}{2} \gamma I + b_1(c_1 + d_1)^T \right) \right]$$

буде додатно визначеною і $\tau < \tau_0$, де

$$\tau_0 = \frac{\lambda_{\min} [C_1(\gamma, c, d)]}{2|H_1 B_2|(|A_2| + |B_2|)\sqrt{\varphi(H_1)}} .$$

Використовуючи приведені в попередній теоремі 3 перетворення, запишемо матрицю $C_1(\gamma, c, d)$ у вигляді

$$C_1(\gamma, c, d) = -\gamma H_1 - H_2 - \Delta_1(c, d)$$

Крім того, як випливає з позначень,

$$H_1 B_2 = (S^T H S) S^{-1} [B + b d^T] S = S^T H (B + b d^T) S .$$

І одержимо

$$\tau_0 = \frac{\lambda_{\min} [-\gamma H_1 - H_2 - \Delta_1(c, d)]}{2|S^T H (B + b d^T) S|(|S^{-1}(A + b c^T)S| + |S^{-1}(B + b d^T)S|)\sqrt{\varphi(H_1)}} .$$

тобто твердження теореми 3.3.4.

ЛІТЕРАТУРА

1. Андреева Е.А., Колмановский В.Б., Шайхет Л.Е. Управление системами с последействием. – М., Наука, 1992. – 336 с.
2. Марченко В.Л. Модальное управление в системах с запаздыванием // Автоматика и телемеханика, №11, 1988. – С.73-84.
3. Кожаметов А.Т. Стабілізація систем с запізненням до заданої функції Ляпунова // Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки, в.3, 1998. – С.199-206.
4. Хусайнов Д.Я., Кожаметов А.Т. Управление линейной системой до заданной функции Ляпунова // Украинский математический журнал, Т.10, №10, 1998. – С.199-206.

Надійшла до редакції 10.05.2005

Юрій В. Крак*
Микола М. Шатковський*

Yuriy V. Krak*
Mykola M. Shatkovskyy*

**Сегментація мовної інформації
для задач автоматичного
озвучення**

**Speech information segmentation
for automatic insonification
problems**

*Запропоновано новий алгоритм
сегментації та конкатенації мовної
інформації для TTS синтезу.
Наводиться модель представлення
текстової інформації як послідовності
елементів синтезу*

*Ключові слова: сегмент,
сегментація, синтез*

*New speech information
segmentation and concatenation
algorithms for TTS synthesis are proposed.
Model of the text information
representation as a sequence of synthesis
elements is adduced.*

*Key words: segment, segmentation,
synthesis*

*E-mail: krak@unicyb.kiev.ua, shatkovskyy@ukr.net

В даній роботі розглядається один із методів вирішення задачі синтезу мови – сегментивний конкатенативний TTS синтез. Приводяться модель представлення текстової інформації у вигляді послідовності елементів синтезу та алгоритм автоматичної сегментації і конкатенації довільної текстової інформації. Демонструється підхід до задачі конкатенативного TTS синтезу який базується на сучасних концепціях мовотворення. Пропонується створити та використовувати мовні сегменти (деякі штучні мовні одиниці) як базові елементи синтезу мови. Наводиться приклад роботи алгоритму та описуються переваги такого підходу до вирішення задачі синтезу природної мови – зменшення кількості розривів сигналу за рахунок збільшення елементів синтезу (сегментів) вихідного звукового сигналу, врахування наголосів та просодики слова в синтезованій мові.

Одним із підходів до вирішення проблеми синтезу природних мов є TTS (Text-to-Speech) синтез [1]. Це комп'ютерна система яка озвучує подану на її вхід текстову інформацію, автоматично утворюючи нові слова, фрази, речення тощо. Характерними рисами такої системи є:

- озвучення довільної текстової інформації;
- багаторівнева обробка вхідної інформації;
- велика кількість елементів синтезу та їх параметрів.

Загальна постановка задачі роботи конкатенативного TTS синтезу має такий вигляд:



Рис. 1. Загальна схема роботи системи TTS синтезу.

Спочатку оброблюється вхідна текстова інформація. Виділяються ознаки та параметри конкатенативного синтезу, проводяться аналіз та сегментація тексту на текстові елементи синтезу (починаючи від алофонів, закінчуючи складеними сегментами синтезу – в залежності від конкретного TTS методу).

Згідно проведеного аналізу, необхідні звукові елементи (еквівалентні текстовим сегментам) синтезу мови (завчасно, згідно певної конкретної конкатенативної системи синтезу, записані реальні мовні сигнали) зазнають необхідної дії методів обробки звукових елементів.

Оброблені мовні звукові сигнали поступають на блок озвучення звукових елементів, де і відбувається генерування вихідного звукового сигналу шляхом їх конкатенації, з подальшими діями по їх озвученню, запису в різноманітні звукові файли тощо.

Провівши аналіз задачі створення систем конкатенативного TTS синтезу можна виділити декілька основних проблем в цій області:

1. Структура модуля конкатенації визначається розміром та розмірністю бази даних природних звукових мовних елементів, оскільки безпосередньо залежить від природних даних, тим самим забезпечуючи високу природність звучання згенерованої мови. Тому при підвищенні природності звучання синтезованої мови зростатиме і розмірність елементної бази синтезу [1].

2. Системи конкатенативного синтезу маніпулюють мовними сигналами як сукупностями звукових елементів. Тому для покращення роботи системи необхідно розробити таку структуру сегментації/конкатенації природних мовних елементів, яка б враховувала та використовувала ознаки природності звучання мовних сигналів.

3. Класичними елементами конкатенативного синтезу є алофони, дифони, трифони, склади/напівсклади.

4. Оскільки, при синтезі мовних сигналів безпосереднім чином використовуються реальні мовні дані, то для створення та підвищення ефективності роботи створених систем сегментації мовної інформації

необхідно приділити особливу увагу дослідженню мовознавчої теорії, а саме розділам морфології, фонетики та словотвору.

Ціллю даної статті є розробка моделі представлення тестової інформації у вигляді послідовності елементів синтезу та алгоритму автоматичної сегментації і конкатенації довільної текстової інформації для задач синтезу природних мов в рамках конкатенативного TTS синтезу.

Модель представлення мовної інформації (для задачі конкатенативного сегментивного синтезу):

$$w_i = p_j s f_k$$

де $w_i \in W$ – слово із множини слів української мови W ,

$p_j \in P$ – деякий префіксний сегмент із множини префіксних сегментів P ,

$s = \bigcup i_m$ – деякий набір внутрішніх сегментів $i_m \in I$ із множини внутрішніх сегментів I ,

$f_k \in F$ – деякий суфіксний (кінцевий) сегмент із множини суфіксних сегментів F .

Зауваження: Внутрішня частина $s = \bigcup i_m$ в конкретних словах може і бути відсутня, наприклад в двоскладових словах $w_i = p_j f_k$, або, навпаки, розкладатися на декілька сегментів. А однокладові слова розглядатимуться окремо.

Слово розкладатиметься на три частини, відповідно до множин сегментів, причому, в множинах сегментів містяться як наголошені сегменти, так і не наголошені, і представлятиме собою послідовність певних сегментів, які вже міститимуть в собі просодику слова. А самі сегменти вибиратимуться (із відповідної множини сегментів) якнайбільшими, тобто такими, що складаються з якнайбільшої кількості літер/звуків. Це зменшить кількість конкатенацій сегментів, що підвищить природність звучання синтезованої мови.

Розкладання слова принципово залежить від вигляду сегментів. Наведемо правила вибору (побудови) сегментів для конкатенативного сегментивного синтезу.

Типи сегментів:

1. Префіксні:

- префікси (без-, від-, воз-, про-, ...),
- частини коренів або цілі корені (абст-, аква-, архі-, ...),
- семантичні підоддиниці,
- префікси з частинами коренів (зчіп-, зшк-, під'ї-, ...),
- склади (ма-, ли-, ко-, ...),
- окремі літери (з-, т-, о-, ...);

2. Внутрішні:

- склади (-ві-, -ти-, -не-, ...),
- „складно синтезовані” буквосполучення (-жджа-, -ффи-, -лла-, ...),
- окремі літери (-к-, -в-, -а-, ...);

3. Суфіксні (кінцеві):

- склади (-во, -ди, -мі, ...),
- суфіксальні закінчення (-льник, -нька, -сько, ...),
- семантичні підоддиниці (-метр, -мент, ...),
- „складно синтезовані” буквособолучення (-вство, -ття, ...),
- окремі літери (-в, -к, ...).

Для покриття всієї множини слів української мови слід побудувати повну базу мовних сегментів. А для забезпечення природності звучання синтезованої мови необхідно розробити певну структуру поділу слів на елементи, котрі надалі використовуватимуться в оберненій задачі – конкатенації.

Алгоритм сегментації та конкатенації елементів синтезу.

Нехай $T = \bigcup_i T_i$ – вхідний текст,

де T_i – слово у текстовому вигляді.

На вхід парсера поступає певний T .

0. $j = 0$

1. $j = j + 1$

2. Якщо $T_j = Z_k$, то Z_k дописується в вихідний файл, повертаємось в п.1,

де Z_k – слово у звуковому вигляді.

Якщо $T_j \neq Z_k$, то T_j розбивається на якнайбільші частини, причому таким чином:

– вибирається якнайбільший префіксний сегмент $p_i \in P$, що відповідає префіксній частині T_j та його звуковий еквівалент $p^* \in P^*$, із множини префіксних звукових сегментів P^* ;

– вибирається якнайбільший суфіксний сегмент $f_k \in F$, що відповідає кінцевій частині T_j та його звуковий еквівалент $f^* \in F^*$, із множини суфіксних звукових сегментів F^* ;

– вибираються якнайбільші (а їх тоді буде, відповідно, якнайменше) внутрішні сегменти $s = i_{m1} \cup i_{m2} \cup \dots \cup i_{mn}$, $i_m \in I$, що відповідають внутрішній частині T_j та їх звукові еквіваленти $i_m^* \in I^*$ із множини внутрішніх звукових сегментів I^* .

3. Обрані сегменти дописуються у вихідний звуковий потік/файл в такій послідовності:

– префіксний звуковий сегмент $p^* \in P^*$;

– підряд кожний із внутрішніх звукових сегментів від i_{m1}^* до i_{mn}^* , $i_m^* \in I^*$;

– суфіксний звуковий сегмент $f^* \in F^*$.

4. Якщо не кінець роботи (тобто слово T_i не останнє), то в вихідний звуковий потік/файл дописується відповідна пауза (між словами) і повертаємось в п.1.

Приклад. Розглянемо роботу запропонованої концепції на прикладі сегментації слова "квазіперіоди_чність", де "_" – робочий символ виділення наголошеного голосного. Згідно парсера, слово розділиться на три основні частини – "квазі-", "-періоди_ч-", "-ність", а внутрішня частина додатково розділиться ще на 5 частин – "-пе-", "-рі-", "-о-", "-ди-", "-ч-". І, після роботи алгоритму сегментації, слово представлятиметься послідовністю 7 сегментів та 5 стиків сегментів (розривів сигналу) – "квазі-", "-пе-", "-рі-", "-о-", "-ди_ч-", "-ч-", "-ність". Сегментація проводитиметься строго згідно бази мовних сегментів. Для порівняння, у випадку фонемного синтезу слово представлятиметься принаймні 16 сегментами та 15 стиками сегментів.

Зауваження: При запропонованому підході елементи сегментації та конкатенації визначаються базою мовних сегментів. Тобто, можливі і інші послідовності сегментів синтезу, в залежності від бази мовних сегментів.

Проведені дослідження показали, що використання в системах конкатенативного синтезу мови мовних сегментів різної довжини є ефективним способом досягнення природності звучання згенерованого вихідного потоку звукової мовної інформації. Такі результати пояснюються тим, що вже на вході системи синтезу використовуватимуться природні сигнали, а маніпулювання вибором довжини вхідних мовних сигналів (виходячи зі зменшення кількості розривів природних сигналів та збільшення їх розмірів) підвищить нерозривність вихідного звукового сигналу такої системи.

Література

1. Wolfgang Hess. Speech synthesis – a solved problem? // Signal Processing VI, – 1992. pp. 37-46
2. Винцюк Т.К. Анализ, распознавание и интерпретация речевых сигналов. – Киев: Наук. думка, 1987. – 264 с.
3. Крак Ю.В., Вінцюк Т.К., Кириченко М.Ф., Гаращенко Ф.Г., Бармак О.В. Розробка комп'ютерних технологій моделювання та керування віртуальними образами при синтезі мовлення//Шоста всеукраїнська міжнародна конференція „Оброблення сигналів і зображень та розпізнавання образів” УКРОБРАЗ’2002, 8-12 жовтня 2002р., Київ, Україна. Праці.: Видання УАОІРО, Київ 2002. ст.23-26.

УДК 519.852:519.876

Володимир І. Кудін¹,

Volodymyr I. Kudin¹,

**Аналіз моделі Леонт'єва
при нечітко заданій множині
обмежень на змінні**

**Analyzis of structure solution of
input-output models of Leontief**

*Застосовано метод базисних
матриць для дослідження моделі
Леонт'єва*

*Method of baze matrix for input-
output models of Leontief is research.*

*Ключові слова: система лі-
нійних рівнянь, базисна
матриця, розв'язок, розмиті
обмеження*

*Key Words: linear systems, baze
matrix, solution, fuzzy constraints*

E-mail: v_i_kudin@mail.ru

Модель Леонт'єва (МЛ) можна інтерпретувати як задачу прогнозу затрат-випуску продукції на основі відомої статистичної інформації про значення елементів технологічної матриці при нечітко заданому векторі обмежень та межах змінних [1-2]. Вектор правих частин обмежень МЛ може зазнавати змін, що зумовило постановку задачі як динамічної[2]. Суттєвим ускладненням МЛ є включення в обмеження меж на змінні[3]. Слід зазначити, що при її дослідженні, як допоміжні, наряду з системами лінійних алгебраїчних рівнянь з квадратною невиродженою матрицею обмежень (СЛАР), системами лінійних алгебраїчних нерівностей з відповідною матрицею обмежень (СЛАН), використано також і задачу лінійного програмування (ЗЛП) [4-5].

Загалом, дослідження МЛ включає дві фази аналізу: якісну та кількісну. На фазі проведення якісного аналізу, визначається склад цінкових та ресурсних параметрів, а також формуються функції належності. В подальшому особа приймаюча рішення (ОПР) на їх основі визначає нечітку множину в залежності від вибраного рівня належності [4]. На фазі кількісного аналізу потрібно переконатись в несуперечливості вибраних структурних елементів моделі [6-9].

Постановка задачі. Нехай маємо МЛ виду

$$u = A^T u^T + y^T, \quad (1)$$

де $A^T = \{a_{ij}\}_{i=1, \dots, m}^{j=1, \dots, m}$ невідроджена квадратна матриця розмірності (m, m) , $u = (u_1, u_2, \dots, u_m)$ - вектор змінних [1,2], для якого $u \in U_\lambda$, $U_\lambda = \bigcup_{\lambda \in [0,1]} U_\lambda$,
 $U_\lambda = \left\{ u / \prod_{i=1}^m U_\lambda^{(i)} = \prod_{i=1}^m [U_i^{(-)}, U_i^{(+)}], 1 \geq \mu_{u_i}(u) \geq \lambda, u \in [U_i^{(-)}, U_i^{(+)}] \subseteq (-\infty, +\infty) \right\}$
 $Y^T = (y_1, y_2, \dots, y_m)$ - вектор обмежень, з властивістю $Y \in Y_\lambda$, $Y_\lambda = \bigcup_{\lambda \in [0,1]} Y_\lambda$

$$Y_\lambda = \left\{ y / \prod_{i=1}^m Y_\lambda^{(i)} = \prod_{i=1}^m [Y_i^{(-)}, Y_i^{(+)}], 1 \geq \mu_{y_i}(y) \geq \lambda, y \in [Y_i^{(-)}, Y_i^{(+)}] \subseteq (-\infty, +\infty) \right\}$$

нечіткі множини рівня λ , згідно $\mu_{u_i}(u)$, $\mu_{y_i}(y)$, $i \in I$ - заданих кусково-лінійних функцій належності [4] з областю значень $[0,1]$, областю визначення $(-\infty, +\infty)$, $i \in I = (1, 2, \dots, m)$ - індекси рядків та стовпців матриці обмежень, T - знак транспонування. Модель (1) досліджується в евклідовому просторі E^m . При наявності в контурі прийняття рішення експертів (ОПР) фаза якісного аналізу (1)-(2) визначає наступну задачу кількісного аналізу при вказаних рівнях вибору ОПР $\lambda^{(p)}$, $p = \{1, 2, \dots, p\}$ - послідовність задач при додаткових обмеженнях виду

$$\begin{aligned} u \in \left\{ \prod_{i=1}^m U_p^{(i)} = \prod_{i=1}^m [U_{i(p)}^{(-)}, U_{i(p)}^{(+)}], p \in P \right\}, \\ Y \in \left\{ \prod_{i=1}^m Y_p^{(i)} = \prod_{i=1}^m [Y_{i(p)}^{(-)}, Y_{i(p)}^{(+)}], p \in P \right\}, \end{aligned} \quad (2)$$

Мета роботи. Розробка математичного апарату проведення кількісного аналізу розв'язності за сумісністю, властивостей компонент обмежень (активності, пасивності) задачі (1)-(2) на кожній із p стадій уточнення параметрів після фази якісного аналізу моделі.

Поширити методологію послідовного аналізу [3,5] та методу базисних матриць (МБМ) [5] на клас задач (1),(2).

Наведемо деякі положення МБМ, що ґрунтується на ідеї базисної матриці [5]. Базисні матриці в ході ітерацій послідовно змінюються вводом-виводом із неї рядків-нормалей обмежень моделі виду

$$A^T u^T \leq C^T, \quad (3)$$

де $C^T = (c_1, c_2, \dots, c_n)$, $u^T = (u_1, u_2, \dots, u_m)$, $a_j = (a_{j1}, a_{j2}, \dots, a_{jm})$, $j = (1, 2, \dots, n)$ - рядки матриці A^T , $n > m$, яка є узагальненням (1),(2).

Визначення 1. Підматрицю A_6 матриці A^T , складену із m лінійно незалежних нормалей обмежень (3), будемо називати базисною, а розв'язок $u_0 = (u_{01}, u_{02}, \dots, u_{0m})$ системи рівнянь $A_6 u^T = C^0$ базисним.

Нехай $\alpha_r = (\alpha_{r1}, \alpha_{r2}, \dots, \alpha_{rm})$ - вектор розвинення нормалі обмеження $a_r u \leq c_r$ за рядками базисної матриці A_b , $\Delta_r = a_r u_0^T - c_r$ - нев'язка r -го обмеження (3) в вершині u_0 . Встановлено [5] формули зв'язку базисного розв'язку, коефіцієнтів розвинення нормалей обмежень та цільової функції (4), коефіцієнтів оберненої матриці, нев'язок обмежень та значень цільової функції та інших елементів симплекс-методу при переході до наступної базисної матриці.

Теорема 1. Для існування єдиного розв'язку (1) необхідно і достатньо, щоб $\alpha_{ri}^{(i)} \neq 0$, $i = \overline{1, m}$, де $\alpha_{ri}^{(i)}$ ведучі елементи симплексної ітерації МБМ по заміщенню рядків базисної матриці (2) нормаллями обмежень (1).

Введемо $U = \{ u / a_j u^T \leq c_j, j \in J \}$, $U_r = \{ u / a_j u^T \leq c_j, j \in J, J \neq r \}$.

$$U_r^{(0)} = \{ u / a_r u^T = c_r \}, U_r^{(-)} = \{ u / a_r u^T \leq c_r \}.$$

Визначення 2. Обмеження $a_r u^T \leq c_r$ пасивне, якщо $U = U_r$.

Визначення 3. Обмеження $a_r u^T \leq c_r$ породжуюче нерозв'язність за несумісністю, якщо $U = \emptyset$, $U_r \neq \emptyset$.

Теорема 2. Для того, щоб обмеження $a_r u^T \leq c_r$ було пасивним для (3) необхідно і достатньо існування, A_b та u_0 відносно яких розвинення $\alpha_{rk} \geq 0$ для всіх k та $\Delta_r = a_r u_0^T - c_r \leq 0$.

Теорема 3. Для несумісності множини (3) $U = \emptyset$, $U_r \neq \emptyset$, $U = U_r \cap U_r^{(-)}$ необхідно і достатньо існування A_b та u_0 таких, що $\alpha_{ri} \leq 0$, $i = \overline{1, m}$ та $\Delta_r = a_r u_0^T - c_r > 0$.

Введемо для обмеження $a_r u^T \leq c_r$, $c_r \in Y_p^{(r)}$, $r \in I$ моделі

$$\max \{ a_r u^T / u \in U_p \} \text{ та } \min \{ a_r u^T / u \in U_p \},$$

де $c_{rH(p)}$, $c_{rB(p)}$, $u_{rH(p)}$, $u_{rB(p)}$, $A_{rH(p)}^{-1}$, $A_{rB(p)}^{-1}$ відповідно оптимальні значення цільових функцій та розв'язки, оптимальні базисні матриці, $\alpha_{(H)rk}$ $k = \overline{1, m}$, $\alpha_{(B)rk}$ $k = \overline{1, m}$ - коефіцієнти розвинення нормалей цільових функцій за рядками відповідних базисних матриць моделей, U_p , $p = \overline{1, k}$ множина відповідна обмеженням на змінні (2).

Теорема 4. (Про структурні властивості півпросторів).

При $c_r < c_{rH(p)}$, виконання $\alpha_{rk} \geq 0$, $k = \overline{1, m}$ - пасивність обмеження $a_r u^T \geq c_r$; при $\alpha_{ri} \leq 0$, $i = \overline{1, m}$ породження нерозв'язності для $a_r u^T \leq c_r$;

при $c_r > c_{r(B)}^0$ виконання $\alpha_k \geq 0, k = \overline{1, m}$, то $a_r u^T \leq c_r$ пасивне; а при $\alpha_i \leq 0, i = \overline{1, m}$, $a_r u^T \geq c_r$ породжує нерозв'язність;

при $c_{r(H)}^0 < c_r < c_{r(B)}^0$ межі активності $a_r u^T \leq c_r$ та $a_r u^T \geq c_r$ для (3);

Наслідок 1. (Про структурні властивості гіперплощини).

При $c_r < c_{r(H)}^0$, виконується $\alpha_k \geq 0, k = \overline{1, m}$ або $\alpha_i \leq 0, i = \overline{1, m}$, то гіперплощина (1) породжує нерозв'язність системи (1),(2);

при $c_r = c_{r(H)}^0$, $\alpha_k > 0, k = \overline{1, m}$, то гіперплощина обмеження має дотик в єдиній точці до (2), при $c_r = c_{r(H)}^0$, $\alpha_k \geq 0, k = \overline{1, m}$, $\exists i_0$ такий, що $\alpha_{i_0} = 0$ та при $c_r = c_{r(H)}^0$, $\alpha_k \leq 0, k = \overline{1, m}$, $\exists i_0$ $\alpha_{i_0} = 0$ область сумісності системи (1),(2) належить гіперплощині;

при $c_r > c_{r(B)}^0$, $\alpha_k \geq 0, k = \overline{1, m}$ та при $\alpha_i \leq 0, i = \overline{1, m}$ гіперплощина (1) породжує нерозв'язність (1),(2);

при $c_{r(H)}^0 < c_r < c_{r(B)}^0$ межі виконання необхідних умов розв'язності системи (1),(2);

при $c_r = c_{r(B)}^0$, аналогічно, випадку $c_r = c_{r(H)}^0$.

Введемо величини $\delta = \min_{j \in J} \frac{u_{j(B)} - u_{j(H)}}{2}$ - мінімальний радіус сфери

вписаної в $\Pi_{\lambda(p)}$, $R = \sqrt{\sum_{j=1}^m \left(\frac{u_{j(B)} - u_{j(H)}}{2} \right)^2}$ - радіус сфери описаної навколо

$\Pi_{\lambda(p)}$ з центром в точці $u_{0(sr)} = \left(\frac{u_{1(B)} + u_{1(H)}}{2}, \frac{u_{2(B)} + u_{2(H)}}{2}, \dots, \frac{u_{m(B)} + u_{m(H)}}{2} \right)$,

відстань від заданої точки $u_{0(sr)}$ до r -ої гіперплощини $d_r = \frac{|a_r u_{0(sr)}^T - c_r|}{\|a_r\|}$.

Наслідок 2. Достатньою умовою існування єдиного розв'язку (1),(2) є виконання $u_0^{(i)} \in \Pi_{\lambda(p)}$, $\alpha_k^{(i)} \neq 0, i = \overline{1, m}$, на ітераціях заміщення рядків базисної матриці (2) рядками (1).

Наслідок 2. Достатньою умовою існування єдиного розв'язку (1),(2) є виконання $\|u_0^{(i)} - u_{0(sr)}\| < \delta$, $\alpha_k^{(i)} \neq 0, i = \overline{1, m}$, на ітераціях заміщення рядків (2) рядками (1)

Наслідок 3. Необхідною і достатньою умовою нерозв'язності (1),(2) є виконання $c_r \notin [c_{r(H)}^0, c_{r(B)}^0]$ принаймні для одного $r \in I$.

Наслідок 4. Необхідною і достатньою умовою нерозв'язності (1),(2) є виконання $R_r < d_r$ принаймні для одного $r \in I$.

Наслідок 5. Необхідною умовою розв'язності (1),(2) є виконання $c_{r(N)}^0 < c_r < c_{r(N)}^0, \forall r \in I$.

Наслідок 6. Необхідною умовою розв'язності (1),(2) є виконання $R_r > d_r, \forall r \in I$.

Справедливість теореми 4 та наслідків 1-5 витікає з теорем про пасивність та нерозв'язність.

Висновки. Застосування ідеології послідовного аналізу та МБМ дає змогу: досліджувати властивості розв'язків СЛАР та СЛАН (1),(2) при змінах в векторах обмежень; проводити построзрахунковий аналіз властивостей системи при зміні значень окремих елементів та її компонент; використовувати розв'язок початкової системи при аналізі "збуреної" системи; знаходити розв'язок "квадратної" системи рівнянь за фіксовану кількість кроків; аналізувати коректність побудови моделі - на наявність пасивних та породжуючих нерозв'язність за несумісністю компонент на стадії як дорозрахункового аналізу так і на стадії розв'язання при уточненні функції належності чи інтервалів належності параметрів.

Література

1. Леонтьев В.В., Форд Д. Межотраслевой анализ воздействия структуры экономики на окружающую среду// Экономика и математические методы.- 1972.-Т.VIII,-Вып.3.-с.370-400
2. Гасс С. Линейное программирование. Физматгиз,-1961
3. Волошин А.Ф. Метод локализации области оптимума в задачах математического программирования // Докл. АН СССР. - 1987. -293, N 3.- С. 549-553.
4. Орловский С.А. Принятие решения при нечеткой исходной информации.- М.: Наука,-1981,- 206с.
5. Волошин А.Ф. Войналович В.М., Кудян В.И. Предоптимизационные и оптимизационные схемы сокращения размерности задачи линейного программирования // Автоматика, N4, 1993.

Надійшла до редакції 04.04.2005

УДК 681.3

Олександр О. Марченко

**Методи автоматизації
мовної локалізації розроблених
онтологічних баз знань**

В статті описані методи та алгоритми автоматизації мовної локалізації розроблених онтологічних баз знань.

Ключові слова: системи обробки природної мови, семантичні мережі, онтологічна семантика.

E-mail: rozenkrans@yandex.ru

Oleksandr O. Marchenko

**The Methods of Automatic
Language Localization of
Developed Ontological Knowledge
Bases**

The methods and the algorithms of Automatic Language Localization of Developed Ontological Knowledge Bases is described.

Key Words: natural language processing, semantic network, ontological semantics.

Дуже актуальним напрямком на сьогоднішній день є розробка онтологічних семантичних баз знань. На основі побудованих онтологій створюються потужні системи інтелектуальної обробки текстів природною мовою – програми машинного перекладу, системи підтримки природномовного діалогу з користувачем, програми автоматичного реферування та анотування текстів, семантичного пошуку та багато інших[1].

Комп'ютерні онтологічні бази знань, побудовані по моделі WordNet[2], є одним з найбільш розповсюджених типів лексико-семантичних ресурсів, що використовуються в сфері інформаційних технологій. Особливості цих баз, що об'єднують в собі риси довідкової системи і інструменту для проведення лінгвістичних досліджень, відкривають широкі можливості їх практичного і теоретичного застосування.

В області інформаційного пошуку wordnet-словники зручно використовувати для розширення запити користувача за рахунок парадигматично і синтагматично зв'язаних слів, наприклад, компонентів синсета разом з його гіпонімами та співгіпонімами або зв'язків типу «дісслово – актант», що дадуть можливість здійснювати контекстний пошук[2]. Дані про синтагматичні відношення слів дозволяють застосовувати wordnet-словники для вирішення класичної задачі зняття неоднозначності смислу слова. Wordnet можна використовувати для

обчислення смислової близькості текстів на основі гіпернимічних відношень.

В багатьох країнах ведеться робота по мовній локалізації WordNet. В рамках великого проекту EuroWordNet дослідники намагаються збагатити WordNet додатковими семантичними відношеннями та локалізувати базу до основних європейських мов. Серед аналогічних крупних дослідницьких програм мовної адаптації WordNet важливе місце займають BalkaNet(для балканських мов) та DeutscheWordNet.

WordNet вже встиг стати загальноприйнятою семантичною базою – “спільним семантичним знаменником”, який дає можливість дослідникам з різних країн створювати інтелектуальні лінгвістичні системи, сумісні один з одним за рахунок спільного інтерфейсу та єдиного семантичного поля. Тому задачу мовної локалізації Wordnet важко переоцінити. З іншого боку, створення власної семантичної бази з “нуля” є на сьогодні невідомою з економічної та моральної точок зору задачею. Абсолютна більшість дослідників, що працюють в області семантики мови, використовують WordNet як базове семантичне поле.

В ході досліджень, що проводилися за участю автора, був виконаний великий об’єм робіт по мовній локалізації WordNet до української та російської мов. Було перекладено більш ніж 130 000 синсетів Wordnet. Потім по перекладеним спискам синсетів був згенерований україно-російськомовний індексний файл згідно загальноприйнятому формату. Тобто, завдяки цьому згенерованому файлу можна по українському чи російському слову знайти номери синсетів Wordnet, що відображають всі його смислові значення.

Автоматизований мовний переклад онтологічних баз знань типу Wordnet. Був розроблений алгоритм автоматичного перекладу семантично-лексичної бази Wordnet. Вхід алгоритму файли даних Wordnet[2] та електронний англо-російський словник Мюллера наступного формату:

$a \{ \text{categ } \{ j, \{ a_j \} \} \},$

де a – слово англійською мовою;

categ – граматична категорія (іменник, прикметник, дієслово, прислівник);

j – номер смислу (семантичної інтерпретації);

$\{ a_j \}$ – множина слів російської мови, що відповідають j -тому смислу слова a .

Алгоритм автоматичного перекладу полягає в наступному:

По черзі оброблюються синсети з dat-файлів Wordnet. Алгоритм записує номер синсету L_i і за допомогою словника перекладає всі англійські слова.

що трапляються в цьому синсеті. Зрозуміло, що із словника система обирає лише переклади, що стосуються потрібної синтаксичної категорії. В результаті ми в синсеті для кожного з англійських слів $e_i \in S_L$ отримаємо множину можливих перекладів російською мовою $\{r_{ij}\}$. Але синсет є набором слів, що в одній мові відповідають деякому фіксованому семантичному об'єкту. З можливих перекладів цих слів на іншу мову потрібно обрати лише ті, що посилаються в цій мові на той самий семантичний об'єкт. Це означає що з множин перекладів $\{r_{1j}\} \{r_{2j}\} \dots \{r_{nj}\}$ англійських слів $e_1, e_2, \dots, e_n$, що потрапили в деякий синсет L , треба обрати лише ті слова, що потрапили в кожен з множин перекладів. Знайшовши перетин $\{r_{1j}\} \cap \{r_{2j}\} \cap \dots \cap \{r_{nj}\} = \cap \{r_{ij}\}$ система отримує російський синсет для номеру L . Проблеми постають лише у випадках, коли в синсеті міститься лише одне слово, або в електронному словнику не знаходиться жодного перекладу. Переклавши всі англійські синсети українською (російською) мовою, ми отримаємо файл перекладу, який система проходить ще раз з початку до кінця та генерує український (або російськомовний) індексний файл, який по російському слову дозволяє визначити номери синсетів, на які це слово семантично посилається. Наведемо декілька прикладів роботи алгоритму.

Приклад 1.

Синсет номер 00062171 складається з множини слів $\langle \text{capitulation, fall, surrender} \rangle$. За допомогою електронного словника Мюллера отримаємо переклади всіх слів з синсету:

capitulation	– 1. капитуляция,сдача
surrender	- 1. сдача,капитуляция
fall	- 1. сдача,капитуляция
	2. падение
	3. водопад
	4. осень

Згідно алгоритму в російський синсет потрапляють слова, що є перекладами всіх трьох слів синсету, – слова з «перетину трансляцій». Тому отримаємо:

00062171 $\langle$ сдача,капитуляция $\rangle$

Далі в індексний файл в строках слів “сдача” та “капитуляция” додається номер 00062171.

Приклад 2.

Маємо синсет 00062725 < overturn, upset >

В словнику Мюлера отримуємо:

overturn 1. низвержение, переворот
upset 1. низвержение, переворот
2. расстройство, огорчение

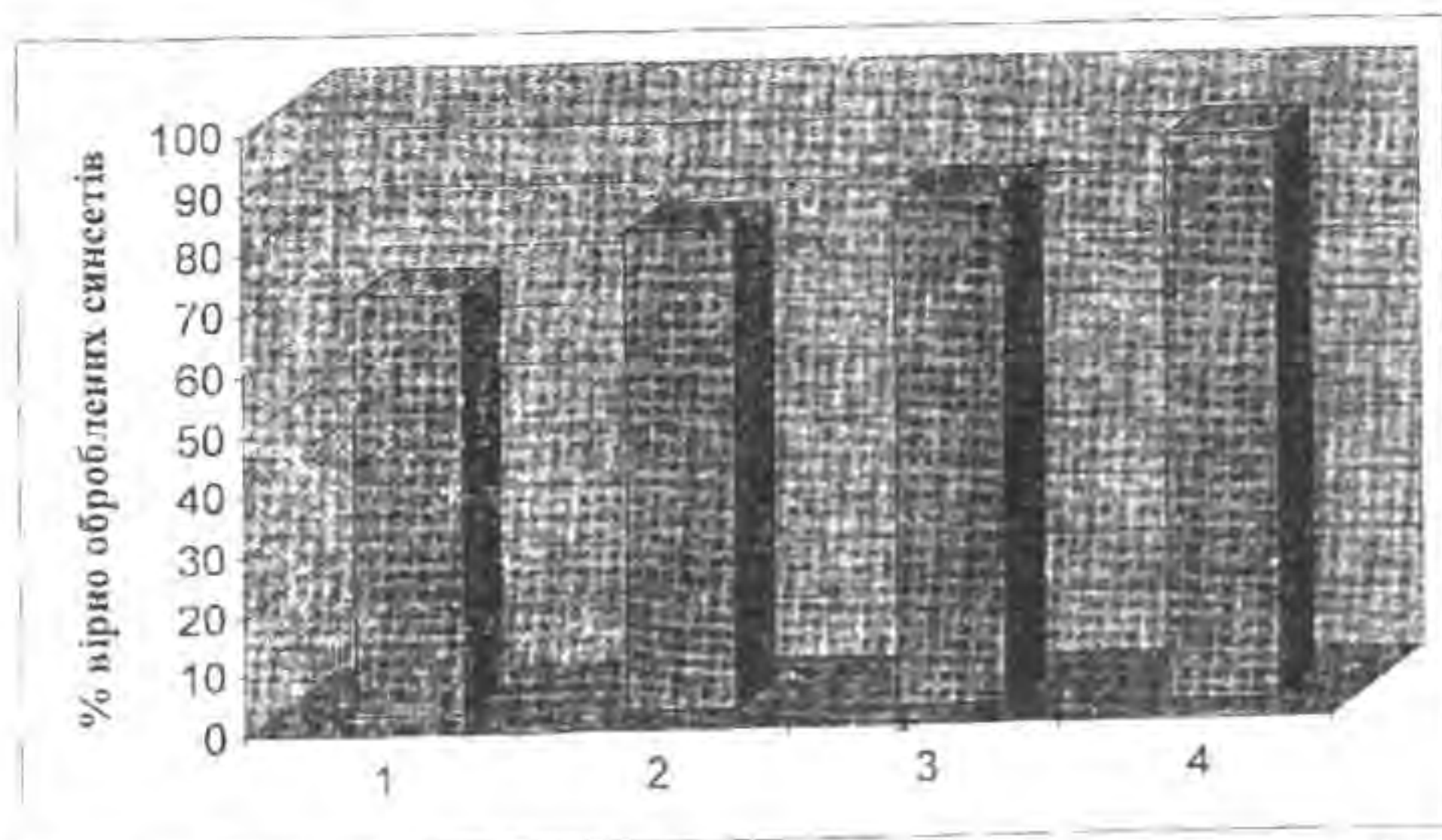
В російський синсет попадає < низвержение, переворот >

В індексному файлі в строках “низвержение”, “переворот” записується номер 00062725.

Обробка чотирьох файлів даних Wordnet вищенаведеним алгоритмом автоматичного перекладу для іменників, дієслів, прикметників та прислівників виявила такі показники ефективності методу:

70	80	85	94
Іменники	Дієслова	Прислівники	Прикметники

Таблиця 1. Показники ефективності алгоритму автоматичного перекладу (у відсотках коректно оброблених синсетів).



Графік 1. Показники вірно перекладених алгоритмом синсетів по синтаксичним категоріям (1 – іменники, 2- дієслова, 3 – прислівники, 4 – прикметники).

На жаль алгоритм працює в автоматизованому(не автоматичному) режимі через те, що на сьогодні не існує достатньо якісного електронного англо-російського чи англо-українського словника, який би забезпечив вимоги алгоритму. Тому після його роботи залишається достатньо ручної роботи.

На основі білінгвістичної семантичної бази Wordnet була розроблена система білінгвістичного аналізу, що виконує семантичний аналіз текстів машинного перекладу і виправляє неточності перекладу згідно принципу максимальної семантичної близькості до контексту слів в реченнях.

Контекстна близькість в системі інтерпретується як найкоротший шлях в мережі Wordnet, що можна побудувати між синсетами слів-альтернативних варіантів перекладу та синсетами оточуючих слів околу в тексті. Ми завжди із всіх альтернатив обираємо той варіант перекладу, що відповідає найкоротшому шляху між синсетами слів тексту.

Література

1. Sergei Nirenburg and Victor Raskin, Ontological Semantics, 2001, [//crl.nmsu.edu/stuff.pages/Techial/book/index-book.html](http://crl.nmsu.edu/stuff.pages/Techial/book/index-book.html)
2. Miller, G., Wordnet: An online lexical database, International Journal of Lexicography, 3(4), 1990.

Надійшла до редакції 28.09.2005

УДК 518.9

Сергій О.Мащенко¹,

Sergey O. Mashchenko¹,

Векторні рівноваги у змішаних стратегіях

A Vectorial equilibrium in the mixed strategies

Пропонуються необхідні та достатні умови векторної рівноваги у змішаному розширенні багатокритеріальної гри.

The necessary and sufficient conditions of vectorial equilibrium in the mixed expansion of multicriterion game are offered.

Ключові слова: векторна рівновага, змішані стратегії, багатокритеріальна гра.

Keywords: vectorial equilibrium, mixed strategies, multicriterion game

¹E-mail: msomail@yandex.ru

Багатокритеріальна гра відрізняється від класичної тим, що функції виграшу гравців є векторними, а не скалярними. Необхідність введення такої функції пояснюється різносторонністю інтересів гравців, а тому постає вимога оцінювання виграшу по сукупності показників (критеріїв).

Розглянемо багатокритеріальну гру $G = (X_i, U_i; i \in N)$ в нормальній формі, де $N = \{1, 2, \dots, n\}$ - множина з n гравців; X_i - множина стратегій i -го гравця; $U_i(x) = (u_i^j(x))_{j \in L_i}$ - вектор критеріїв, $L_i = \{1, 2, \dots, l_i\}$ - множина індексів критеріїв i -го гравця, l_i - їх кількість (кожен критерій $u_i^j(x)$ є функцією, яка визначена на множині ситуацій гри $X = \prod_{i \in N} X_i$ і приймає

дійсні значення). Кожний із гравців прагне одержати по можливості більше значення усіх одразу своїх критеріальних функцій виграшу.

Перевагу на множині ситуацій гри за векторами виграшів гравців будемо задавати, так званими, аксіомами Парето [1], які полягають у наступному. Відповідно до сильної аксіоми Парето, кажуть, що ситуація x домінує ситуацію y за вектором критеріїв $U(x) = (u_i^j(x))_{i \in N, j \in L_i}$ (позначають це через $U(x) \succ U(y)$), якщо $u_i^j(x) \geq u_i^j(y)$, $j \in L_i$, і хоч одна нерівність є строгою, тобто $U(x) \neq U(y)$. За слабкою аксіомою, вважається, що x сильно домінує y (позначають це через $U(x) \succ \succ U(y)$), якщо $u_i^j(x) > u_i^j(y)$, $\forall j \in L_i$.

Для формалізації аналогу рівноваги за Нешем [2] в умовах багатокритеріальної гри уведемо спеціальні відношення домінування, які

називається відповідно до відношення переваги на множині ситуацій гри: сильним та слабким відношеннями домінуванням за Нешем [3]. Кажуть, що ситуація x багатокритеріальної гри G домінує (сильно домінує) за Нешем ситуацію x' , якщо вона дістається із ситуації x зміною якимось, хоча б одним гравцем, своєї стратегії домінує (сильно домінує) її за вектором критеріїв i -го гравця, тобто:

$$\begin{aligned} x \succ^{NE} x' &\Leftrightarrow \exists i \in N : U_i(x_i, x_{-i}) \succ U_i(x'_i, x_{-i}) \\ (x \succ \succ^{NE} x' &\Leftrightarrow \exists i \in N : U_i(x_i, x_{-i}) \succ \succ U_i(x'_i, x_{-i})). \end{aligned}$$

Задача знаходження векторної рівноваги у багатокритеріальній грі полягає у пошуку такої ситуації гри x^* , що якщо до початку гри гравці складуть необов'язкову угоду (за порушення угоди не передбачено жодної карної санкції) про те, що будуть дотримуватися ситуації $x^* = (x_i^*)_{i \in N}$, а потім незалежно один від іншого приймуть рішення про вибір своєї стратегії, то кожному з них окремо буде не вигідно вибирати іншу стратегію ніж x_i^* , $i \in N$.

Відповідно до відношень домінування за Нешем, визначимо множини сильних та слабких векторних рівноваг [3] (далі будемо позначати їх відповідно через $SVE(G)$ та $WVE(G)$), які складаються із ситуацій x^* , що не домінуються (сильно не домінуються) за Нешем жодною іншою:

$$x^* \in SVE(G) \Leftrightarrow \neg \exists x \in X : x \succ^{NE} x^* \quad (x^* \in WVE(G) \Leftrightarrow \neg \exists x \in X : x \succ \succ^{NE} x^*).$$

Властивості та умови існування сильних та слабких векторних рівноваг розглянуті в роботах [3,4]. Із цих досліджень видно, що як рівновага за Нешем у класичних іграх, так і векторні рівноваги у багатокритеріальних іграх, на жаль, не завжди існують. Одним із відомих [2] радикальних прийомів знайти їм "заміну" у класичних однокритеріальних іграх є зміна умов гри. Гравцям пропонується приймати рішення опосередковано через спеціально побудований тоталізатор, який реалізує випадковий вибір стратегій за певним розподілом імовірностей (його називають змішаною стратегією) на множині їх стратегій.

У цій роботі досліджується змішане розширення багатокритеріальної гри з точки зору побудови та існування векторних рівноваг. Розглядається випадок, коли множини стратегій гравців є скінченими.

Будемо казати, що багатокритеріальна гра $GM = \langle M_i, U_i; i \in N \rangle$ є змішаним розширенням скінченої багатокритеріальної гри G , якщо:

- множина змішаних стратегій i -го гравця:

$$M_i = \{ \mu_i = \mu_i(x_i)_{x_i \in X_i} \mid \mu_i(x_i) \geq 0, x_i \in X_i; \sum_{x_i \in X_i} \mu_i(x_i) = 1 \};$$

- змішані стратегії: $\mu_i = \mu_i(x_i)_{x_i \in X_i}$ (це дискретні розподіли

імовірностей на множині стратегій i – го гравця, які ми будемо представляти векторами, що складається з $|X_i|$ компонент);

- змішані ситуації гри: $\mu = (\mu_i)_{i \in N}$ - елементи множини змішаних ситуацій гри $M = \prod_{i \in N} M_i$;

- вектор-функція математичного сподівання виграшу i – го гравця - $\bar{U}_i(\mu) = (\bar{u}_i^j(\mu))_{j \in L_i}$, де $\bar{u}_i^j(\mu) = \sum_{x \in X} u_i^j(x) \prod_{k \in N} \mu_k(x_k)$ - математичне сподівання виграшу i – го гравця за j – м критерієм, $j \in L_i$.

Для спрощення викладок іноді будемо виділяти в $\bar{u}_i^j(\mu)$ змішану стратегію i – го гравця. Для цього зробимо наступні позначення:

$$\begin{aligned} \bar{u}_i^j(\mu) &= \sum_{x \in X} u_i^j(x) \prod_{k \in N} \mu_k(x_k) = \sum_{x_i \in X_i} \mu_i(x_i) \left(\sum_{x_{N \setminus i} \in X_{N \setminus i}} u_i^j(x_i, x_{N \setminus i}) \prod_{k \in N \setminus i} \mu_k(x_k) \right) = \\ &= \sum_{x_i \in X_i} v_i^j(x_i, \mu_{N \setminus i}) \mu_i(x_i) = \langle b_i^j(\mu_{N \setminus i}), \mu_i \rangle, j \in L_i, i \in N. \end{aligned} \quad (1)$$

Одразу слід відмітити, що множина стратегій M_i гравця $i \in N$ є опуклою та компактною (вона за означенням є $(|X_i| - 1)$ - вимірним одиничним симплексом), а функції виграшу $\bar{u}_i^j(\mu)$ є лінійними за кожною імовірністю $\mu_i(x_i)$, $x_i \in X_i$.

Знайти векторні рівноваги у змішаних стратегіях за визначенням є досить складною задачею. Виникає питання, а чи можна звести цю задачу до відомої? Це питання позитивно розв'язується для знаходження як слабких, так і сильних векторних рівноваг.

Нехай $\langle \alpha_i, \bar{U}_i(\mu) \rangle$ - лінійна згортка вектор-функції математичного сподівання виграшу i – го гравця за вектором коефіцієнтів $\alpha_i = (\alpha_i^j)_{j \in L_i}$, які ми будемо вважати невідомими параметрами.

Розглянемо однокритеріальну параметричну гру:

$$GM(\alpha) = (M_i, \langle \alpha_i, \bar{U}_i(\mu) \rangle; i \in N).$$

Позначимо множину значень параметрів α через:

$$A_{20} = \{ \alpha = (\alpha_i)_{i \in N} = (\alpha_i^j)_{i \in N, j \in L_i} : \alpha_i^j \geq 0, j \in L_i; \sum_{j \in L_i} \alpha_i^j = 1, i \in N \}$$

Теорема 1. Множина слабких векторних рівноваг змішаного розширення гри G співпадає з родиною по параметру $\alpha \in A_{20}$ рівноваг за Нешем змішаного розширення параметричної гри $GM(\alpha)$, тобто $WVE(GM) = \bigcup_{\alpha \in A_{20}} NE(GM(\alpha))$.

Доведення.

Покажемо

спочатку

включення

$\bigcup_{\alpha \in A_{\geq 0}} NE(GM(\alpha)) \subseteq WVE(GM)$. Зафіксуємо деяке значення $\alpha \in A_{\geq 0}$. Нехай $\mu^* \in NE(GM(\alpha))$. За означенням Нешівської рівноваги для однокритеріальної гри [2], із рахунком позначень (1), маємо: $\forall \mu_i \in M_i, \forall i \in N: \sum_{j \in L_i} \alpha'_j \langle b'_j(\mu^*_{N \setminus i}, \mu_i), \mu^*_i \rangle \geq \sum_{j \in L_i} \alpha'_j \langle b'_j(\mu^*_{N \setminus i}, \mu_i), \mu_i \rangle$. (2)

Припустимо супротивне. Нехай $\mu^* \notin WVE(GM)$, тоді $\exists \mu \in M: \mu \succ^{NE} \mu^*$, тобто $\exists i \in N: \langle b'_i(\mu^*_{N \setminus i}, \mu_i), \mu_i \rangle > \langle b'_i(\mu^*_{N \setminus i}, \mu^*_i), \mu^*_i \rangle, \forall j \in L_i$. Просумуємо ці нерівності з коефіцієнтами $\alpha'_i \geq 0: \sum_{j \in L_i} \alpha'_j = 1$, одержимо:

$\exists i \in N: \sum_{j \in L_i} \alpha'_j \langle b'_j(\mu^*_{N \setminus i}, \mu_i), \mu_i \rangle > \sum_{j \in L_i} \alpha'_j \langle b'_j(\mu^*_{N \setminus i}, \mu^*_i), \mu^*_i \rangle$, що суперечить умові (2). Отже $\mu^* \in WVE(GM)$.

Доведемо включення $WVE(GM) \subseteq \bigcup_{\alpha \in A_{\geq 0}} NE(GM(\alpha))$. Нехай $\mu^*(x) \in WVE(GM)$, отже, за означенням слабкої векторної рівноваги, $\neg \exists \mu \in M: \mu \succ^{NE} \mu^*$, тобто $\forall i \in N, \neg \exists \mu_i \in M_i: \bar{U}_i(\mu_i, \mu^*_{N \setminus i}) \succ^{NE} \bar{U}_i(\mu^*_i, \mu^*_{N \setminus i})$. Іншими словами, із рахунком позначень (1), система нерівностей:

$\langle b'_i(\mu^*_{N \setminus i}, \mu_i), \mu_i \rangle > \langle b'_i(\mu^*_{N \setminus i}, \mu^*_i), \mu^*_i \rangle, j \in L_i$, не буде мати розв'язків за умовою $\mu_i \in M_i$. Оскільки ліві частини нерівностей є лінійними за μ_i , а тому є увігнутими функціями, за теоремою Фана-Гліксберга-Гоффмана [5] існує такий вектор $\alpha^* = (\alpha^*_j)_{j \in L_i} \geq 0$, що:

$$\sum_{j \in L_i} \alpha^*_j \langle b'_j(\mu^*_{N \setminus i}, \mu_i), \mu_i \rangle \leq \sum_{j \in L_i} \alpha^*_j \langle b'_j(\mu^*_{N \setminus i}, \mu^*_i), \mu^*_i \rangle.$$

А це у свою чергу, із рахунком позначень (1) та за означенням Нешівської рівноваги означає, що: $\mu^* \in NE(GM(\alpha^*)) \subseteq \bigcup_{\alpha \in A_{\geq 0}} NE(GM(\alpha))$. ♦

Позначимо: $A_{>0} = \{\alpha = (\alpha_i)_{i \in N} = (\alpha'_j)_{j \in L_i, i \in N}: \alpha'_j > 0, j \in L_i; \sum_{j \in L_i} \alpha'_j = 1, i \in N\}$.

Теорема 2. Множина сильних векторних рівноваг змішаного розширення гри G співпадає з родиною по параметру $\alpha \in A_{>0}$ рівноваг за Нешем змішаного розширення параметричної гри $GM(\alpha)$, тобто $SVE(GM) = \bigcup_{\alpha \in A_{>0}} NE(GM(\alpha))$.

Доведення. Покажемо спочатку включення $\bigcup_{\alpha \in A_{>0}} NE(GM(\alpha)) \subseteq SVE(GM)$. Нехай $\mu^* \in NE(GM(\alpha))$, при деякому $\alpha \in A_{>0}$. За означенням Нешівської рівноваги для однокритеріальної гри

[2], із рахунком позначень (1), маємо: $\forall \mu_i \in M_i, \forall i \in N$:

$$\sum_{j \in L_i} \alpha_j' \langle b_j'(\mu_{-i}^*, \mu_i^*), \mu_i^* \rangle \geq \sum_{j \in L_i} \alpha_j' \langle b_j'(\mu_{-i}^*, \mu_i), \mu_i \rangle. \quad (3)$$

Припустимо супротивне. Нехай $\mu^* \notin WVE(GM)$, тоді $\exists \mu \in M : \mu \succ^{NE} \mu^*$, тобто:

$$\exists i \in N : \begin{cases} \langle b_i'(\mu_{-i}^*, \mu_i), \mu_i \rangle \geq \langle b_i'(\mu_{-i}^*, \mu_i^*), \mu_i^* \rangle, \forall j \in L_i, \\ \exists k \in L_i : \langle b_i^k(\mu_{-i}^*, \mu_i), \mu_i \rangle > \langle b_i^k(\mu_{-i}^*, \mu_i^*), \mu_i^* \rangle. \end{cases}$$

Просумуємо ці нерівності з коефіцієнтами $\alpha_j' > 0$, одержимо:

$$\sum_{j \in L_i} \alpha_j' \langle b_j'(\mu_{-i}^*, \mu_i), \mu_i \rangle > \sum_{j \in L_i} \alpha_j' \langle b_j'(\mu_{-i}^*, \mu_i^*), \mu_i^* \rangle, \text{ а це суперечить умові (3).}$$

Отже $\mu^* \in WVE(GM)$.

Доведемо включення $SVE(GM) \subseteq \bigcup_{\alpha \in A_{>0}} NE(GM(\alpha))$. Нехай

$\mu^* \in SVE(GM)$, тому за означенням сильної векторної рівноваги $\neg \exists \mu \in M : \mu \succ^{NE} \mu^*$, тобто $\forall i \in N, \neg \exists \mu_i \in M_i : \bar{U}_i(\mu_i, \mu_{-i}^*) > \bar{U}_i(\mu_i^*, \mu_{-i}^*)$. Іншими словами, із рахунком позначень (1), для $\forall i \in N$, система лінійних

$$\text{нерівностей: } \begin{cases} \sum_{x_i \in X_i} v_j^j(x_i, \mu_{-i}^*) \mu_i(x_i) \geq \sum_{x_i \in X_i} v_j^j(x_i, \mu_{-i}^*) \mu_i^*(x_i), \forall j \in L_i, \\ \exists k \in L_i : \sum_{x_i \in X_i} v_i^k(x_i, \mu_{-i}^*) \mu_i(x_i) > \sum_{x_i \in X_i} v_i^k(x_i, \mu_{-i}^*) \mu_i^*(x_i), \end{cases} \quad \text{за}$$

умовою: $\sum_{x_i \in X_i} \mu_i(x_i) = 1; \mu_i(x_i) \geq 0, x_i \in X_i$, буде несумісною.

Нехай $X_i^* = \{x_i | \mu_i^*(x_i) = 0\}$ - множина чистих стратегій i -го гравця, імовірність вибору яких за змішаною стратегією μ^* , дорівнює нулю. Тоді

$$\text{за умовою: } \sum_{x_i \in X_i} \mu_i(x_i) = 0; \mu_i(x_i) \geq 0, x_i \in X_i^*, \quad (4)$$

буде несумісною лінійна система нерівностей:

$$\begin{cases} \sum_{x_i \in X_i} v_j^j(x_i, \mu_{-i}^*) \mu_i(x_i) \geq 0, \forall j \in L_i, \\ \exists k \in L_i : \sum_{x_i \in X_i} v_i^k(x_i, \mu_{-i}^*) \mu_i(x_i) > 0, \end{cases} \quad (5)$$

Дійсно, якщо припустити супротивне, що змішана стратегія μ_i є її розв'язком, то легко впевнитися підстановкою, що змішана стратегія $\bar{\mu}_i = \mu_i^* + \epsilon \mu_i$, $\epsilon > 0$, буде утворювати ситуацію $(\bar{\mu}_i, \mu_{-i}^*) \succ^{NE} \mu^*$, що суперечить умові $\mu^* \in SVE(GM)$.

З несумісності систем лінійних нерівностей (4),(5) за теоремою Таккера про альтернативу для систем лінійних нерівностей [6] слідує

існування векторів $\alpha_i^j > 0$, $j \in L_i$; $\lambda_i = \lambda_i(x_i)_{x_i \in X_i} \geq 0$ та довільного числа λ_i^0 таких, що виконуються рівності:

$$\sum_{j \in L_i} \alpha_i^j v_i^j(x_i, \mu_i^*) = \lambda_i^0 - \lambda_i(x_i), \quad x_i \in X_i^*, \quad (6)$$

$$\sum_{j \in L_i} \alpha_i^j v_i^j(x_i, \mu_i^*) = \lambda_i^0, \quad x_i \in X_i \setminus X_i^* \quad (7)$$

$$\lambda_i^0(1 - \sum_{x_i \in X_i} \mu_i^*(x_i)) + \sum_{x_i \in X_i} \lambda_i(x_i) \mu_i^*(x_i) = 0. \quad (8)$$

Нехай μ_i - довільна змішана стратегія i -го гравця. Запишемо добуток кожної рівності (6), (7) із $\mu_i(x_i) - \mu_i^*(x_i)$, візьмемо їх суму по $x_i \in X_i$ та за допомогою (8) оцінимо праву частину одержаної рівності:

$$\begin{aligned} \sum_{x_i \in X_i} (\mu_i(x_i) - \mu_i^*(x_i)) \left(\sum_{j \in L_i} \alpha_i^j v_i^j(x_i, \mu_i^*) \right) &= \sum_{x_i \in X_i^*} (\mu_i(x_i) - \mu_i^*(x_i)) (\lambda_i^0 - \lambda_i(x_i)) + \\ &+ \sum_{x_i \in X_i \setminus X_i^*} (\mu_i(x_i) - \mu_i^*(x_i)) \lambda_i^0 = \sum_{x_i \in X_i} (\mu_i(x_i) - \mu_i^*(x_i)) \lambda_i^0 - \sum_{x_i \in X_i^*} (\mu_i(x_i) - \mu_i^*(x_i)) \lambda_i(x_i) = \\ &= \lambda_i^0 - \sum_{x_i \in X_i} \mu_i^*(x_i) \lambda_i^0 + \sum_{x_i \in X_i^*} \mu_i^*(x_i) \lambda_i(x_i) - \lambda_i^0 + \sum_{x_i \in X_i} \mu_i(x_i) \lambda_i^0 - \sum_{x_i \in X_i^*} \mu_i(x_i) \lambda_i(x_i) = \\ &= \sum_{x_i \in X_i} (1 - \mu_i^*(x_i)) \lambda_i^0 + \sum_{x_i \in X_i^*} \mu_i^*(x_i) \lambda_i(x_i) - \sum_{x_i \in X_i} (1 - \mu_i(x_i)) \lambda_i^0 - \sum_{x_i \in X_i^*} \mu_i(x_i) \lambda_i(x_i) = \\ &= - \sum_{x_i \in X_i} (1 - \mu_i(x_i)) \lambda_i^0 - \sum_{x_i \in X_i^*} \mu_i(x_i) \lambda_i(x_i) = - \sum_{x_i \in X_i^*} \mu_i(x_i) \lambda_i(x_i) \leq 0. \end{aligned}$$

Останні співвідношення слідують з умови: $\sum_{x_i \in X_i} \mu_i(x_i) = 1$; $\mu_i(x_i) \geq 0$, $x_i \in X_i$.

Тому із рахунком позначень (1), маємо: $\forall i \in N$:

$$\sum_{j \in L_i} \alpha_i^j \langle b_i^j(\mu_i^*), \mu_i^* \rangle \geq \sum_{j \in L_i} \alpha_i^j \langle b_i^j(\mu_i^*), \mu_i \rangle, \quad \forall \mu_i \in M_i.$$

Звідси за означенням Нешівської рівноваги для однокритеріальної гри [2], маємо: $\mu^* \in NE(GM(\alpha)) \subseteq \bigcup_{\alpha \in A_{\geq 0}} NE(GM(\alpha))$. ♦

Теореми, що доведені вище, дають можливість сформулювати наступний важливий наслідок.

Наслідок (про існування векторних рівноваг у змішаних стратегіях). Якщо множини "чистих" стратегій гравців X_i є скінченими, то у змішаному розширенні багатокритеріальної гри множина слабких векторних рівноваг включає в себе множину сильних векторних рівноваг і вони є непорожніми підмножинами множини змішаних ситуацій гри GM , тобто: $WVE(GM) \supseteq SVE(GM) \neq \emptyset$.

Доведення. Включення $WVE(GM) \supseteq SVE(GM)$ елементарно слідує з визначень множин слабких та сильних векторних рівноваг.

З цього включення слідує, що для доведення теореми достатньо

довести її твердження лише для множини $SVE(GM)$.

Оскільки за теоремою 2, $SVE(GM) = \bigcup_{\alpha \in A_{\geq 0}} NE(GM(\alpha))$, то

розглянемо однокритеріальну гру $GM(\alpha) = \left\langle M_i, \sum_{j \in L_i} \alpha_j \bar{u}_i^j(\mu); i \in N \right\rangle$ при

будь яких: $\alpha_j' > 0, j \in L_i, i \in N$. Оскільки множини стратегій гравців M_i є опуклими та компактними (вони, за означенням, є $(X_i|-1)$ -мірними одиничними симплексами), а функції виграшу гравців є лінійними за кожною окремою імовірністю $\mu_i(x_i), x_i \in X_i$, та неперервні на множині змішаних ситуацій гри $M = \prod_{i \in N} \mu_i$ (лінійна згортка лінійних за кожною

окремою імовірністю функцій), то гра $GM(\alpha)$ задовольняє припущенням теореми Неша [2], а отже для неї існує не порожня компактна множина рівноважних за Нешем ситуацій. Звідси слідує не порожність множини $SVE(GM)$. ♦

У висновку слід сказати, що проведене дослідження змішаного розширення багатокритеріальної гри дає конструктивний підхід як для знаходження, так і для більш глибокого вивчення властивостей векторних рівноваг.

Література.

1. Подиновский В.В., Ногин В.Д. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач. – М.: Наука, 1982.
2. Мулен Э. Теория игр с примерами из математической экономики. – М.: Мир, 1985.
3. Мащенко С. О., Павлюченко О.Г. Загальні умови векторної рівноваги за Нешем// Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. -2004, –4.-с.169-177.
4. Мащенко С.О. Рівновага за Нешем у багатокритеріальній грі// Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. -2001. –3.-с.214-222.
5. Mangasarian O.J. Nonlinear programming. New York-London: McGraw-Hill, 1969.
6. Рокафелар Р. Выпуклый анализ. М: Мир, 1973.

Надійшла до редакції 27.10.2005

УДК 517.929.4

Анатолій В. Нікітін

Anatoly V. Nikitin

Ітераційна процедура знаходження розв'язку матричного узагальненого рівняння Сільвестра для стохастичних динамічних систем не розв'язаних відносно диференціалів

The iteration procedure of finding of the solution of a template generalized Sylvester equation for stochastic dynamical systems, which are not received to the differentials

У роботі запропоновано ітераційний метод розв'язання узагальненого матричного рівняння Сільвестра для систем стохастичних диференціальних рівнянь, не розв'язаних відносно диференціалів.

In this article it is consider the iteration method of finding of the solutions of a generalized matrix Sylvester equation for the systems of stochastic differential equations, which are not solved to the differentials

Ключові слова: стохастичні динамічні системи, не розв'язані відносно диференціалів, матричне узагальнене рівняння Сільвестра, ітераційна процедура.

Key Words: stochastic dynamical systems, a template generalized Sylvester equation, which are not received to the differentials, an iteration procedure.

E-mail: nik_tol@rambler.ru

При аналізі стійкості стохастичних динамічних систем вигляду

$$Ddx(t) = Ax(t)dt + Bx(t)dW(t) + \int_U C(u)x(t)\tilde{v}(dt, du), t > t_0, \quad (1)$$

$$x(t_0) = x_0, \quad (2)$$

де $\{W(t)\}$ - скалярний вінерівський процес; $\tilde{v}(dt, du)$ - центрована пуассонівська міра, A, B, D - дійсні сталі матриці розмірності $n \times n$; $C(u)$ - матриця-функція така, що

$$\int_U |C(u)|^2 \Pi(du) < +\infty,$$

виникає узагальнене матричне рівняння Сільвестра вигляду

$$A^T H D + D^T H A + B^T H B + \int_U C^T(u) H C(u) \Pi(du) = -Q, \quad (3)$$

де матриця $Q = Q^T > 0_{n \times n}$ - довільна.

Якщо визначити матрицю $H=H^T > 0_{n \times n}$, то питання побудови для системи СДР (1) функції Ляпунова у вигляді квадратичної форми

$$v=x^T Hx,$$

розв'язане.

Розглянемо операторне рівняння

$$G[x]=F[x], \quad (4)$$

яке визначене у повному метричному просторі R^n з метрикою $\rho(x,y)$.

Наведемо узагальнення принципу стиснутих відображень [2]:

Нехай у повному метричному просторі R^n задані оператори F і G , які володіють властивостями:

1) оператори F і G^{-1} переводять точки простору R^n у точки цього ж простору, тобто $F[x] \in R^n, G^{-1}[x] \in R^n, x \in R^n$;

2) оператори F і G^{-1} є операторами послідовного стискання, тобто існують сталі $\alpha > 0$ і $\beta > 0$ такі, що

$$\rho(F[x], F[y]) \leq \alpha \rho(x, y), 0 < \alpha < 1, \{x, y\} \subset R^n,$$

$$\rho(G^{-1}[x], G^{-1}[y]) \leq \beta \rho(x, y), 0 < \beta < 1, \{x, y\} \subset R^n.$$

Тоді операторне рівняння (4) має єдиний розв'язок x^* , який може бути знайдений методом послідовних ітерацій

$$x^* = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k, \quad (5)$$

де $x_{k+1} = G^{-1}[F[x_k]], k \in N \cup \{0\}$.

Застосуємо цей модифікований принцип стиснутих відображень до розв'язання узагальненого матричного рівняння Сільвестра (3).

Позначимо

$$F[H] = Q + B^T H B + \int_U C^T(u) H C(u) \Pi(du),$$

$$G[H] = -A^T H D - D^T H A.$$

і перепишемо рівняння (3) у вигляді

$$-A^T H D - D^T H A = Q + B^T H B + \int_U C^T(u) H C(u) \Pi(du) \quad (6)$$

Побудуємо неявний розв'язок рівняння (4) за ітераційною схемою

$$G[H_{k+1}] = F[H_k], k=0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

Встановимо твердження, яке буде достатньою умовою збіжності методу (7) до розв'язку рівняння (6). При цьому під збіжністю розумітимемо той факт, що послідовність $\{H_k, k \geq 0\}$ збігається до розв'язку рівняння, тобто

$$\lim_{k \rightarrow \infty} H_k = H^*$$

$$-A^T H^* D - D^T H^* A = Q + B^T H B + \int_U C^T(u) H C(u) \Pi(du).$$

Теорема 1. Нехай виконуються наступні умови:

- 1) матриця A гурвіцева;
- 2) $|K'| \leq \beta$; де $K \equiv A^T D \otimes E + E \otimes (A^T D^T)$;
- 3) B – додатно визначена матриця така, що $|B|^2 \leq \frac{\alpha}{2}$;
- 4) для $0 < \alpha < 1$ виконується нерівність

$$\left| \int_U C^T(u) H C(u) \Pi(du) \right| \leq \frac{\alpha}{2} |H|, 0 < \alpha < 1,$$

де C – додатно визначена матриця-функція.

Тоді послідовність H_k одержана за ітераційною схемою $G[H_{k+1}] = F[H_k]$, $k=0, 1, 2, \dots, p$, збігається до розв'язку H^* рівняння (6).

Доведення. Оскільки матриця Q додатно визначена і виконується умова 4), то F – оператор, який переводить простір додатно визначених матриць у себе. Рівняння Ляпунова

$$-A^T H D - D H A = Q, \quad (8)$$

де Q – довільна додатно визначена матриця, має розв'язком додатно визначену матрицю H , тобто оператор G^1 також переводить простір додатно визначених матриць у себе (оскільки виконується умова 1)).

Візьмемо за метрику наступний вираз

$$\rho(H_1, H_2) = \|H_1 - H_2\|,$$

де $\|\cdot\|$ – норма матриці.

Простір додатно визначених матриць із введеною таким чином метрикою буде повним метричним простором. Тоді для збіжності ітераційної схеми залишилось перевірити виконання умови того, що оператори F і G^1 є операторами послідовного стискання. Згідно із введеною вище метрикою та на підставі виконання умов 3) і 4), одержимо ланцюжок нерівностей

$$\begin{aligned} \rho(F[H_1], F[H_2]) &= \|B^T (H_1 - H_2) B + \int_U C^T(u) (H_1 - H_2) C(u) \Pi(du)\| \leq \\ &\leq \|B^2\| \|H_1 - H_2\| + \frac{\alpha}{2} \|H_1 - H_2\| < \alpha \|H_1 - H_2\|. \end{aligned}$$

Отже,

$$\rho(F[H_1], F[H_2]) < \alpha \rho(H_1, H_2), 0 < \alpha < 1.$$

Запишемо рівняння (8) у векторному вигляді:

$$Wh = q,$$

де $W = A^T \otimes ED + E \otimes (A^T D^T)$, $\otimes$ – знак операції кронекерового добутку матриць;

$$h^T = (h_{11}, \dots, h_{1n}, \dots, h_{n1}, \dots, h_{nn}); h_{ij} = h_{ji};$$

$$q^T = (q_{11}, \dots, q_{1n}, \dots, q_{n1}, \dots, q_{nn}); q_{ij} = q_{ji}; i, j = 1, 2, \dots, n.$$

Тоді

$$h = W^{-1} q$$

і

$$\rho(G^1[H_1], G^1[H_2]) = \|W^{-1}h_1 - W^{-1}h_2\| \leq \|W^{-1}\| \|h_1 - h_2\|.$$

Звідси знаходимо, що

$$\|(A^T \otimes ED + E \otimes (A^T D^T))^{-1}\| \leq \beta, 0 < \beta < 1.$$

Остання нерівність і є умовою послідовного стискання для оператора G^1 .

Теорему 1 доведено.

Список використаної літератури

1. Икрамов Х.Д. Численные решения матричных уравнений. – М.: Наука, 1984. – 192 с.
2. Бычков А.С. Условия разрешимости матричного уравнения. – Киев. ун-т. – К., 1992. – Деп. В Укр. НИИ НТИ. 07.10.92. – N 1542 Ук-92.
3. Никитин А.В., Ясинский В.К. Итерационная процедура решения обобщенного матричного уравнения Сильвестра // Кибернетика и системный анализ. - 2000. - N3. - С. 183 - 186.
4. Beresa V.Yu., Nikitin A.V. The Restrictions of Second Moment of the Solution of Linear Stochastic Functional Differential Equations with Poisson Switchings // International Conference on Functional Analyses and its Applications. Dedicated to the 110th anniversary of Stefan Banach. Book of abstracts. May 28 - 31, 2002. – P. 32 - 33.

Надійшла до редакції 05.10.2005

УДК 517.956.6

Олександр О. Покутний¹

Alexander A. Pokutniy¹

Розв'язки лінійних різнице-
вих рівнянь в банаховому
просторі обмежені на всій
цілочисельній вісі

Solutions of linear difference
equations in Banach space
bounded on the entire whole
axis

Доведено теореми про необхі-
дні та достатні умови існування
обмежених на всій цілочисельній ві-
сі розв'язків різницевих рівнянь в
банаховому просторі з нормально-
розв'язним оператором, а також по-
будовано відповідні розв'язки.

Ключові слова: лінійне різницеве
рівняння, розв'язок, ϵ -дихотомія, нор-
мально - розв'язний оператор.

The theorems about requirement
and sufficient condition existence
bounded on the entire whole axis soluti-
ons of difference equations in Banach
space with a normally resolvable operator
are proved and corresponding solutions
are constructed.

Key Words: linear difference equati-
on, solution, ϵ -dichotomy, normally
resolvable operator.

¹E-mail: lenasas@ukr.net

В роботах [1,2,3] розглядалося різницеве рівняння вигляду

$$x_{n+1} = A_n x_n + h_n, n \in \mathbb{Z} \quad (1)$$

в скінченно-вимірних, а також банахових просторах. Було встановлено
необхідні та достатні умови існування обмежених на всій цілочисель-
ній вісі розв'язків у таких рівнянь в скінченновимірних просторах. Дана
стаття є узагальненням леми Палмера [4] на випадок банахового простору
та інших результатів [2,3].

Розглянемо рівняння (1), де $A_n : X \rightarrow X$ — сім'я обмежених
операторів, що мають обмежені обернені та діють з банахового про-
стору X в себе. Припускається, що $h_n \in X$, $A_n, h_n \in B(\mathbb{Z})$, тобто
 $|||A||| = \sup_{n \in \mathbb{Z}} \|A_n\| < +\infty$, $|||h||| = \sup_{n \in \mathbb{Z}} \|h_n\| < +\infty$.

Поряд з (1) будемо розглядати однорідне рівняння:

$$x_{n+1} = A_n x_n \quad (2)$$

Зауважимо, що будь-який розв'язок рівняння (2) володіє властивістю:
 $x_m = \Phi(m, n)x_n, m \geq n$, де $\Phi(m, n) = A_{m-1} \cdot \dots \cdot A_n$ при $m > n$, та
 $\Phi(m, m) = E$. Ясно, що $\Phi(m, 0) = A_{m-1} \cdot \dots \cdot A_0$. Позначимо

$$U(m) := \Phi(m, 0), U(0) = E.$$

Відображення $\Phi(m, n)$ називають еволюційним оператором задачі (2). Припустимо далі, що рівняння (2) є e -дихотомічним на півосях $\mathbb{Z}_+$ та $\mathbb{Z}_-$ з проекторами P та Q на просторі X відповідно, тобто

$$\exists k_1 \geq 1; 0 < \lambda_1 < 1; \exists P(P^2 = P) :$$

$$\begin{cases} \|U(n)PU^{-1}(m)\| \leq k_1\lambda_1^{n-m}, & n \geq m \\ \|U(n)(E-P)U^{-1}(m)\| \leq k_1\lambda_1^{m-n}, & m \geq n \end{cases}$$

для всіх $m, n \in \mathbb{Z}_+$ (дихотомія на $\mathbb{Z}_+$);

$$\exists k_2 \geq 1; 0 < \lambda_2 < 1; \exists Q(Q^2 = Q) :$$

$$\begin{cases} \|U(n)QU^{-1}(m)\| \leq k_2\lambda_2^{n-m}, & n \geq m \\ \|U(n)(E-Q)U^{-1}(m)\| \leq k_2\lambda_2^{m-n}, & m \geq n \end{cases}$$

для всіх $m, n \in \mathbb{Z}_-$ (дихотомія на $\mathbb{Z}_-$).

Теорема 1. Нехай однорідне рівняння (2) є e -дихотомічним на півосях $\mathbb{Z}_+$ та $\mathbb{Z}_-$ з проекторами P та Q відповідно. Нехай також $D = P - (E - Q)$ – нормально-розв'язний оператор. Тоді для того, щоб існували обмежені на всій цілочисельній вісі розв'язки рівняння (1) необхідно і достатньо, щоб виконувалась наступна умова

$$\sum_{k=-\infty}^{+\infty} H(k+1)h_k = 0. \quad (3)$$

Якщо умова (3) виконується, то обмежені розв'язки мають наступний вигляд:

$$x_n(c) = U(n)PP_{N(D)}c + (G[h])(n). \quad (4)$$

де

$$G[h](n) = U(n)Z(n),$$

$$Z(n) = \begin{cases} \sum_{k=0}^{n-1} PU^{-1}(k+1)h_k - \sum_{k=n}^{-\infty} (E-P)U^{-1}(k+1)h_k + \\ + PD^{-1}[\sum_{k=n}^{-\infty} (E-P)U^{-1}(k+1)h_k + \\ + \sum_{k=-\infty}^{-1} QU^{-1}(k+1)h_k], & n \geq 0, \\ \sum_{k=-\infty}^{n-1} QU^{-1}(k+1)h_k - \sum_{k=n}^{-1} (E-Q)U^{-1}(k+1)h_k - \\ - (E-Q)D^{-1}[\sum_{k=0}^{+\infty} (E-P)U^{-1}(k+1)h_k + \\ + \sum_{k=-\infty}^{-1} QU^{-1}(k+1)h_k], & n \leq 0 \end{cases}$$

— узагальнений оператор Гріна задачі знаходження розв'язків обмежених на $\mathbb{Z}$ з наступними властивостями:

$$(G[h])(0+0) - (G[h])(0-0) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} H(k+1)h_k = 0,$$

$$(LG[h])(n) = h(n), \quad n \in \mathbb{Z},$$

де

$$(Lx)(n) := x_{n+1} - A(n)x_n : B(\mathbb{Z}) \rightarrow B(\mathbb{Z}),$$

$H(n+1) = P_{N(D^*)}QU^{-1}(n+1) = P_{N(D^*)}(E-P)U^{-1}(n+1)$, D^- — узагальнено-обернений оператор до оператора D , (див. [5,6]); $P_{N(D)}$ та $P_{N(D^*)}$ — проектори, що проектують X на ядро $N(D)$ та $N(D^*)$ оператора D та D^* відповідно.

Доведення. Загальний розв'язок задачі (1), обмежений на півосях має вигляд:

$$x_n(\xi) = \begin{cases} U(n)P\xi + \sum_{k=0}^{n-1} U(n)PU^{-1}(k+1)h_k - \\ - \sum_{k=n}^{+\infty} U(n)(E-P)U^{-1}(k+1)h_k, & n \geq 0, \\ U(n)(E-Q)\xi + \sum_{k=-\infty}^{n-1} U(n)QU^{-1}(k+1)h_k - \\ - \sum_{k=n}^{-1} U(n)(E-Q)U^{-1}(k+1)h_k, & n \leq 0 \end{cases} \quad (5)$$

Розв'язок, побудований таким чином, є обмеженим на півосях $(\mathbb{Z}_+, \mathbb{Z}_-)$. Дійсно, для всіх $n \geq 0$ маємо $A_n U(n)P\xi = A_n A_{n-1} \dots A_0 P\xi = U(n+1)P\xi$. Тому $x_{n+1} = A_n x_n$, а, отже, задовольняє однорідному рівнянню (2). Далі одержуємо

$$\begin{aligned} & A_n \left(\sum_{k=0}^{n-1} U(n)PU^{-1}(k+1)h_k - \sum_{k=n}^{+\infty} U(n)(E-P)U^{-1}(k+1)h_k \right) + h_n = \\ & = \sum_{k=0}^{n-1} U(n+1)PU^{-1}(k+1)h_k - \sum_{k=n}^{+\infty} U(n+1)(E-P)U^{-1}(k+1)h_k + h_n = \\ & = \sum_{k=0}^n U(n+1)PU^{-1}(k+1)h_k - \sum_{k=n+1}^{+\infty} U(n+1)(E-P)U^{-1}(k+1)h_k + h_n - \\ & \quad - U(n+1)PU^{-1}(n+1)h_n - U(n+1)(E-P)U^{-1}(n+1)h_n = \end{aligned}$$

$$= x_{n+1}(\xi) + h_n - U(n+1)PU^{-1}(n+1)h_n - U(n+1)U^{-1}(n+1)h_n + \\ + U(n+1)PU^{-1}(n+1)h_n = x_{n+1}(\xi), \Rightarrow x_{n+1}(\xi) = A_n x_n(\xi) + h_n.$$

Доведемо, що таким чином визначений розв'язок є обмеженим на пів-
осях. Для цього оцінимо на $\mathbb{Z}_+$ ряди:

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{k=0}^{n-1} U(n)PU^{-1}(k+1)h_k \right\| &\leq \|h\| \sum_{k=0}^{n-1} \|U(n)PU^{-1}(k+1)\| \leq \\ &\leq \|h\| \sum_{k=0}^{n-1} k_1 \lambda_1^{n-k-1} = \|h\| k_1 \lambda_1^n \sum_{k=0}^{n-1} \lambda_1^{-(k+1)} = \\ &= \|h\| k_1 \lambda_1^n \cdot \frac{\frac{1}{\lambda_1} \cdot \left(\left(\frac{1}{\lambda_1} \right)^{n-1} - 1 \right)}{\frac{1}{\lambda_1} - 1} < \infty. \end{aligned}$$

Аналогічно (завдяки тому, що $0 < \lambda_1 < 1$) маємо

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{k=n}^{+\infty} U(n)(E-P)U^{-1}(k+1)h_k \right\| &\leq \|h\| \sum_{k=n}^{+\infty} k_1 \lambda_1^{k+1-n} = \\ &= k_1 \lambda_1^{-n+1} \|h\| \sum_{k=n}^{+\infty} \lambda_1^k = k_1 \lambda_1^{-n+1} \cdot \frac{\lambda_1^n}{1-\lambda_1} < \infty. \end{aligned}$$

Аналогічно доводиться обмеженість розв'язку на $\mathbb{Z}_-$.

Знайдемо умову, при якій розв'язок (5) буде обмежений на всій вісі
цілих чисел. Це буде тоді й лише тоді, коли

$$x_{0+}(\xi) = x_{0-}(\xi).$$

Ця умова рівносильна наступній

$$P\xi - \sum_{k=0}^{+\infty} (E-P)U^{-1}(k+1)h_k = (E-Q)\xi + \sum_{k=-\infty}^{-1} QU^{-1}(k+1)h_k.$$

Розглянемо наступний вектор

$$g = \sum_{k=0}^{+\infty} (E-P)U^{-1}(k+1)h_k + \sum_{k=-\infty}^{-1} QU^{-1}(k+1)h_k.$$

Таким чином, приходимо до операторного рівняння

$$D\xi = g. \tag{6}$$

Оскільки D — нормально розв'язний, то, як відомо з [5,6], необхідною й достатньою умовою розв'язності рівняння (6) є наступна:

$$P_{N(D^*)}g = 0. \quad (7)$$

Оскільки $DP_{N(D)} = 0$, то маємо, що $PP_{N(D)} = (E - Q)P_{N(D)}$. Аналогічно, з того, що $P_{N(D^*)}D = 0$, маємо $P_{N(D^*)}Q = P_{N(D^*)}(E - P)$. При таких зауваженнях умову (7) можна переписати наступним чином:

$$\sum_{k=-\infty}^{+\infty} P_{N(D^*)}QU^{-1}(k+1)h_k = 0$$

або

$$\sum_{k=-\infty}^{+\infty} P_{N(D^*)}(E - P)U^{-1}(k+1)h_k = 0.$$

Таким чином, згідно позначень теореми, умову (3) доведено. Якщо умова (3) виконується, то $\xi = D^-g + PP_{N(D)}c$, для всіх $c \in \mathbb{X}$.

Тоді сім'я обмежених на всій вісі $\mathbb{Z}$ розв'язків буде мати вигляд (4). $\square$

Велику роль в крайових задачах відіграють петерові, d -нормальні та p -нормальні оператори [1,2,6,10,11,13].

Для таких операторів залишається вірною теорема 1, але з деякими уточненнями.

Теорема 2. Нехай виконуються умови теореми 1 та оператор $D = P - (E - Q)$ є d -нормальним. Тоді для того, щоб існували обмежені на всій цілочисельній вісі розв'язки рівняння (1) необхідно і достатньо, щоб виконувались d лінійно-незалежних умов

$$\sum_{k=-\infty}^{+\infty} H_d(k+1)h_k = 0. \quad (8)$$

Якщо умова (8) виконується, то обмежені розв'язки мають вигляд (4), де

$$H_d(n) = [P_{N(D^*)}Q]_d U^{-1}(n) = [P_{N(D^*)}(E - P)]_d U^{-1}(n),$$

$$d \leq m \quad (m = \dim \text{coker } D < \infty) \quad d = \dim(P_{N(D^*)}Q).$$

Доведення. Достатньо врахувати, що оператор $P_{N(D^*)}$ скінченно-вимірний (оскільки він є d -нормальним), а тому й оператор $P_{N(D^*)}Q$ скінченно-вимірний ($R(P_{N(D^*)}Q) \subset R(P_{N(D^*)})$). $\square$

Теорема 3. Нехай виконуються умови теореми 1 та оператор $D = P - (E - Q)$ є n -нормальним. Тоді для того, щоб існували обмежені на всій цілочисельній вісі розв'язки рівняння (1) необхідно і достатньо, щоб виконувалась умова (3). Якщо умова (3) виконується, то рівняння (1) має r -параметричну сім'ю лінійно-незалежних розв'язків

$$x_n(c_r) = U(n)[PP_{N(D)}]_r c_r + (G[h])(n), \quad (9)$$

де $r \leq n$ ($n = \dim \ker(D)$).

Доведення. Оскільки D — n -нормальний оператор, то його ядро скінченної розмірності. Звідси випливає, що оператор $P_{N(D)}$ скінченно-вимірний, а тому і оператор $PP_{N(D)}$ скінченно-вимірний ($R(PP_{N(D)}) \subset R(P_{N(D)})$). Якщо $N(D) = n$, то

$$\dim(PP_{N(D)}) = \dim((E - Q)P_{N(D)}) = r \leq n.$$

□

Теорема 4. Нехай виконуються умови теореми 1 та оператор $D = P - (E - Q)$ є нетеровим. Тоді для того, щоб існували обмежені на всій цілочисельній вісі розв'язки рівняння (1) необхідно і достатньо, щоб виконувались d -умов (8). Якщо умови (8) виконуються, то рівняння (1) має r -параметричну сім'ю лінійно-незалежних розв'язків

$$x_n(c_r) = U(n)[PP_{N(D)}]_r c_r + (G[h])(n) \quad (10)$$

де $r \leq n$ ($n = \dim \ker(D)$), $d \leq m$ ($m = \dim \operatorname{coker} D$).

Наслідок 1. Нехай в умовах теореми 1 $[P, Q] = PQ - QP = 0$ та $PQ = Q$. В такому випадку кажуть, що рівняння (2) є трихотомічним на $\mathbb{Z}$ і неоднорідне рівняння (1) має не менше одного розв'язку на $\mathbb{Z}$ для всіх $h \in B(\mathbb{Z})$.

Доведення. З того, що $P_{N(D^*)}D = 0$ та $DP = (P - (E - Q))P = QP = Q$ маємо $P_{N(D^*)}Q = P_{N(D^*)}DP = 0$. Звідси випливає розв'язність $\forall h_n \in X$. □

Наслідок 2. Якщо в умовах теореми 1 $[P, Q] = PQ - QP = 0$ та $PQ = Q = P$, то неоднорідне рівняння (1) має єдиний обмежений на $\mathbb{Z}$ розв'язок $\forall h_n, n \in \mathbb{Z}$.

Зауваження 1. В цьому випадку система є e -дихотомічною на всій вісі $\mathbb{Z}$. Слід зауважити, що цей наслідок є класичним результатом [2,3]. Теорема 1 при менш жорстких умовах на рівняння, дає можливість знаходити не один обмежений розв'язок, а цілу сім'ю таких розв'язків.

УДК 519.8

Володимир О. Пришляк

**Про представлення для міні-
максних оцінок граничних
значень розв'язків зовнішніх
крайових задач для рівняння
Гельмгольца**

*Доведена теорема про загальний
вигляд мінімаксних оцінок значень
функціоналів від слідів розв'язків
зовнішніх крайових задач для рівняння
Гельмгольца на границі області.
Одержане представлення не залежить
від вигляду цих функціоналів*

*Ключові слова. мінімаксні оцінки,
спостереження, функціонали від
розв'язків.*

Volodymyr O. Pryshlyak

**On the representation of the
minimax estimates for the traces of
solutions to exterior boundary-
value problems for Helmholtz
equation**

*The theorem on a general form of
the minimax estimates of values of
functionals from traces of the solutions to
exterior Helmholtz problems is proved. The
obtained representation for the minimax
estimates does not depend on the form of
these functionals.*

*Key words: minimax estimates,
observations, functionals from
solutions*

*E-mail: priviad@voliacable.com

Вступ

Дана стаття є прозовженням роботи [1]. При цьому зберігаються всі позначення і означення, прийняті в [1]. Посилання вигляду (1.1) буде далі скрізь означати посилання на формулу (1) роботи [1]. Особливо відзначимо, що формулювання задачі мінімаксного оцінювання, про яку йтиме мова далі, міститься в [1].

В даній роботі, використовуючи метод, запропонований в [1], одержано представлення для мінімаксних оцінок значень функціоналів від слідів розв'язків крайових задач для рівняння Гельмгольца, яке не залежить від конкретного вигляду цих функціоналів і цим відрізняється від представлення, отриманого в роботі [1]. А саме, має місце

Теорема 1. Якщо $k \in N(\Omega)$, то мінімаксна середньоквадратична оцінка виразу $l(\varphi)$ має вигляд

$$\widehat{l(\varphi)} = l(\hat{\varphi}), \quad (1)$$

де функція $\hat{\varphi}$ визначається із системи граничних інтегральних рівнянь

$$T_{-\bar{x}} \hat{p} = \sum_{i=1}^m \chi_{\Gamma_i} C_i^* (r_i^2 (y_i(\cdot; \varphi; \eta) - C_i \hat{\varphi})), \quad (2)$$

$$T_{\bar{x}} \hat{\varphi} = (I + K_{\bar{x}}^*)(q^{-2}(I + K_{-\bar{x}})\hat{p} + f_0), \quad (3)$$

функція f_0 визначається формулою (1.21), а права частина в (2) розглядається для кожної реалізації випадкових функцій $y_i((x; \varphi; \eta))$, що належать з ймовірністю 1 до простору $L^2(\Gamma)$. Розв'язок $\hat{p}, \hat{\varphi} \in H^{1/2}(\Gamma)$ цієї системи існує і єдиний.

Доведення. Доведемо спочатку існування та єдиність розв'язку системи інтегральних рівнянь (2), (3). З цією метою для кожного фіксованого $v = (v_1, \dots, v_m) \in H$ введемо функцію $\hat{p}(\cdot; v) \in H^{1/2}(\Gamma)$ як єдиний розв'язок інтегрального рівняння

$$(T_{-\bar{x}} \hat{p}(\cdot; v))(x) = d(x) - \sum_{i=1}^m \chi_{\Gamma_i}(x) (C_i^* v_i)(x), \quad (4)$$

де $d(x)$ визначається формулою

$$d(x) = \sum_{i=1}^m \chi_{\Gamma_i} C_i^* (r_i^2 y_i(\cdot; \varphi; \eta)),$$

в якій права частина розглядається для кожної реалізації випадкових функцій $y_i(x; \varphi; \eta)$, що належать з ймовірністю 1 простору $L^2(\Gamma)$, та розглянемо задачу оптимального керування системою, яка описується інтегральним рівнянням (4) із функцією вартості

$$I(v) := \int_{\Gamma} q^{-2}(x) \left| ((I + K_{-\bar{x}})(\hat{p}(\cdot; v))(x) + q^2(x) f_0(x)) \right|^2 d\Gamma + \sum_{i=1}^m \int_{\Gamma_i} r_i^{-2}(x) |v_i(x)|^2 d\Gamma_i \rightarrow \inf_{v \in H}. \quad (5)$$

Через те, що розв'язок $\hat{p}(x; v)$ інтегрального рівняння (4) можна представити у вигляді $\hat{p}(x; v) = \tilde{\hat{p}}(x; v) + \hat{p}_0(x)$, де через $\tilde{\hat{p}}(x; v)$ позначений розв'язок цього рівняння при $d(x) = 0$, а через $\hat{p}_0(x)$ – розв'язок рівняння

$$(T_{-\bar{x}} \hat{p}_0)(x) = d(x), \quad (6)$$

функціонал (5) можна представити у вигляді

$$I(v) = \bar{I}(v) + 2\operatorname{Re} L(v) + \int_{\Gamma} q^{-2}(x) \left| ((I + K_{-\bar{x}})(\tilde{\hat{p}}(\cdot; v) + \hat{p}_0(\cdot)) + q^2(\cdot) f_0(\cdot))(x) \right|^2 d\Gamma,$$

де

$$\begin{aligned} \bar{I}(v) &= \int_{\Gamma} q^{-2}(x) \left| ((I + K_{-\bar{x}})\tilde{\hat{p}}(\cdot; v))(x) \right|^2 d\Gamma + \sum_{i=1}^m \int_{\Gamma_i} r_i^{-2}(x) |v_i(x)|^2 d\Gamma_i, \\ L(v) &= 2 \int_{\Gamma} q^{-2}(x) \overline{((I + K_{-\bar{x}})(\tilde{\hat{p}}(\cdot; v) + \hat{p}_0(\cdot)) + q^2(\cdot) f_0(\cdot))(x)} ((I + K_{-\bar{x}})\tilde{\hat{p}}(\cdot; v))(x) d\Gamma. \end{aligned}$$

В силу неперервної залежності розв'язку рівняння (4) від правої частини цього рівняння, функція $v \rightarrow \tilde{\hat{p}}(\cdot; v)$ представляє собою лінійний обмежений оператор, який відображає простір H в $L_2(\Gamma)$. Звідси випливає, що $\bar{I}(v)$ – квадратична форма, яка відповідає неперервній напівбілінійній ермітовій формі

$$\pi(v, u) := \int q^{-2}(x) ((I + K_{-\bar{k}}) \tilde{p}(\cdot; v))(x) \overline{((I + K_{-\bar{k}}) \tilde{p}(\cdot; u))(x)} d\Gamma \\ + \sum_{i=1}^m \int_{\Gamma_i} r_i^{-2}(x) v_i(x) \overline{u_i(x)} d\Gamma_i,$$

а $L(v)$ – лінійний неперервний функціонал, заданий в H . Крім того, оскільки

$$\tilde{I}(v) \geq \sum_{i=1}^m \int_{\Gamma_i} r_i^{-2}(x) |v_i(x)|^2 d\Gamma_i \geq c \|v\|_H^2, \quad c = \text{const},$$

то на основі зауваження 1.4 до теореми 1.1 на стр. 11 із [2], випливає існування єдиного елемента $\hat{v} \in H$ такого, що

$$I(\hat{v}) = \inf_{v \in H} I(v).$$

Тому

$$\frac{d}{d\tau} I(\hat{v} + \tau u) \Big|_{\tau=0} = 0$$

для будь-яких $u \in H$ та $\tau \in \mathbb{R}$. Звідси, враховуючи що $\hat{p}(x, \hat{v} + \tau u) = \hat{p}(x, \hat{v}) + \tau \hat{p}(x, u)$, отримуємо

$$0 = \frac{d}{d\tau} I(\hat{v} + \tau u) \Big|_{\tau=0} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} (I(\hat{v} + \tau u) - I(\hat{v})) \\ = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \left(\int q^{-2}(x) (((I + K_{-\bar{k}}) \hat{p}(\cdot; \hat{v} + \tau u))(x) + q^2(x) f_0(x)) \right. \\ \left. \times \overline{(((I + K_{-\bar{k}}) \hat{p}(\cdot; \hat{v} + \tau u))(x) + q^2(x) f_0(x))} d\Gamma \right. \\ \left. - \int q^{-2}(x) |(((I + K_{-\bar{k}}) \hat{p}(\cdot; \hat{v}))(x) + q^2(x) f_0(x))|^2 d\Gamma \right) \\ + \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \left(\sum_{i=1}^m \int_{\Gamma_i} r_i^{-2}(x) (\hat{v}_i(x) + \tau u_i(x)) \overline{(\hat{v}_i(x) + \tau u_i(x))} d\Gamma_i \right. \\ \left. - \sum_{i=1}^m \int_{\Gamma_i} r_i^{-2}(x) |\hat{v}_i(x)|^2 d\Gamma_i \right) \\ = 2\text{Re} \int q^{-2}(x) (((I + K_{-\bar{k}}) \hat{p}(\cdot; \hat{v}))(x) + f_0(x)) \overline{((I + K_{-\bar{k}}) \tilde{p}(\cdot; u))(x)} d\Gamma \\ + 2\text{Re} \sum_{i=1}^m \int_{\Gamma_i} r_i^{-2}(x) \hat{v}_i(x) \overline{u_i(x)} d\Gamma_i \\ = 2\text{Re} \left(\int ((I + K'_k)(q^{-2}(\cdot)(I + K_{-\bar{k}}) \hat{p}(\cdot; \hat{v})) + f_0(\cdot))(x) \overline{\tilde{p}(x; u)} d\Gamma \right. \\ \left. + \sum_{i=1}^m \int_{\Gamma_i} r_i^{-2}(x) \hat{v}_i(x) \overline{u_i(x)} d\Gamma_i \right). \quad (7)$$

Аналогічно із умови

$$\frac{d}{d\tau} I(\hat{v} + i\tau u) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \sqrt{-1}, \quad \forall u \in H, \forall \tau \in \mathbb{R},$$

яка випливає із того, що $\hat{v} \in H$ – єдина точка мінімуму функціонала (5), отримуємо

$$\text{Im} \left(\int ((I + K'_k)(q^{-2}(\cdot)(I + K_{-\bar{k}}) \hat{p}(\cdot; \hat{v})) + f_0(\cdot))(x) \overline{\tilde{p}(x; u)} d\Gamma \right. \\ \left. + \sum_{i=1}^m \int_{\Gamma_i} r_i^{-2}(x) \hat{v}_i(x) \overline{u_i(x)} d\Gamma_i \right) = 0.$$

Звідси та із (7) маємо

$$\left(\int_{\Gamma} ((I + K'_k)(q^{-2}(\cdot)(I + K_{-k})\hat{p}(\cdot; \hat{v})) + f_0(\cdot))(x) \overline{\hat{p}(x; u)} d\Gamma + \sum_{i=1}^m \int_{\Gamma_i} r_i^{-2}(x) \hat{v}_i(x) \overline{u_i(x)} d\Gamma_i \right) = 0. \quad (8)$$

Введемо функцію $\hat{\phi}(x) \in H^{1/2}(\Gamma)$ як розв'язок інтегрального рівняння

$$T_k \hat{\phi} = (I + K'_k)(q^{-2}(\cdot)(I + K_{-k})\hat{p}(\cdot; \hat{v}) + f_0). \quad (9)$$

Тоді

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma} ((I + K'_k)(q^{-2}(\cdot)(I + K_{-k})\hat{p}(\cdot; \hat{v})) + f_0(\cdot))(x) \overline{\hat{p}(x; u)} d\Gamma \\ &= (T_k \hat{\phi}, \hat{p}(\cdot; u))_{L^2(\Gamma)} = (\hat{\phi}, T_{-k} \hat{p}(\cdot; u))_{L^2(\Gamma)} \\ &= -(\hat{\phi}, \sum_{i=1}^m \chi_{\Gamma_i} C_i^* u_i)_{L^2(\Gamma)} = -\sum_{i=1}^m (\hat{\phi}, C_i^* u_i)_{L^2(\Gamma_i)} = -\sum_{i=1}^m (C_i \hat{\phi}, u_i)_{L^2(\Gamma_i)}. \end{aligned} \quad (10)$$

Із (8) та (10) випливає, що

$$\sum_{i=1}^m (r_i^{-2} \hat{v}_i - C_i \hat{\phi}, u_i)_{L^2(\Gamma_i)} = 0,$$

звідки, покладаючи $u_i = r_i^{-2} \hat{v}_i - C_i \hat{\phi}$, отримаємо

$$\sum_{i=1}^m \|r_i^{-2} \hat{v}_i - C_i \hat{\phi}\|_{L^2(\Gamma_i)}^2 = 0.$$

Із останнього співвідношення випливає, що

$$\hat{v}_i(x) = r_i^2(x)(C_i \hat{\phi})(x) = r_i^2(x) \int_{\Gamma} R_i(x, t) \hat{\phi}(t) d\Gamma_t.$$

Підставляючи цей вираз в (4) та позначаючи $\hat{p}(x; \hat{v}) = \hat{p}(x)$, приходимо до висновку, що пара $\hat{p}(x), \hat{\phi}(x)$ є розв'язком системи інтегральних рівнянь (2), (3).

Єдиність розв'язку цієї системи випливає із доведеної єдиності вектор-функції $\hat{v}(x) = (\hat{v}_1(x), \dots, \hat{v}_n(x))$, для якої $I(\hat{v}) = \inf_{v \in H} I(v)$.

Доведемо тепер справедливість представлення (1). Враховуючи (1.18), (1.19) та (2), (3), маємо

$$\begin{aligned} \widehat{I(\varphi)} &= \sum_{i=1}^m (y_i, \hat{u}_i)_{L^2(\Gamma_i)} + \hat{c} \\ &= \sum_{i=1}^m (y_i, r_i^2 C_i \hat{p})_{L^2(\Gamma_i)} + \hat{c} = \sum_{i=1}^m (\chi_{\Gamma_i} C_i^* (r_i^2 y_i), \hat{p})_{L^2(\Gamma)} + \hat{c} \\ &= (T_{-k} \hat{p}, \hat{p})_{L^2(\Gamma)} + \sum_{i=1}^m (\chi_{\Gamma_i} C_i^* (r_i^2 C_i \hat{\phi}), \hat{p})_{L^2(\Gamma)} + \hat{c} \\ &= \overline{(p, T_{-k} \hat{p})_{L^2(\Gamma)}} + \sum_{i=1}^m (C_i^* (r_i^2 C_i \hat{\phi}), \hat{p})_{L^2(\Gamma_i)} + \hat{c} \\ &= \overline{(T_k p, \hat{p})_{L^2(\Gamma)}} + \sum_{i=1}^m (r_i^2 C_i \hat{\phi}, C_i p)_{L^2(\Gamma_i)} + ((I + K'_k) f_0, z)_{L^2(\Gamma)}. \end{aligned} \quad (11)$$

Але

$$\overline{(T_k p, \hat{p})_{L^2(\Gamma)}} = \overline{((I + K'_k)(q^{-2}(I + K_{-k})z), \hat{p})_{L^2(\Gamma)}}$$

УДК 519.9

Наталія О. Россохата

Дослідження задачі трансмісії на власні значення за допомогою FD-методу

Робота присвячена вивченню властивостей власних значень задачі трансмісії з граничними умовами різного типу за допомогою чисельного FD-методу, швидкість збіжності якого не гірша за геометричну прогресію. Вивчені властивості власних значень базової задачі в залежності від набору коефіцієнтів в граничних умовах. На основі асимптотичних оцінок власних значень базової задачі і збіжності FD-методу отримано якісний результат про розташування власних значень досліджуваної задачі.

Ключові слова: FD-метод, задачі трансмісії на власні значення, швидкість збіжності

Natalia O. Rossokhata

Analysis of an eigenvalue transmission problem with FD-method

We apply the numerical FD-method with the convergence rate not worse than that of a geometric series to analyse the eigenvalue transmission problem with various boundary conditions. Properties of the eigenvalues of the basic problem depending on the coefficients in the boundary conditions are obtained. Based on the asymptotic behavior of the eigenvalues of the basic problem and the numerical method, qualitative results about arrangement of the eigenvalues of the original problem are proved.

Key words: FD-method, eigenvalue transmission problem, convergence rate

Вступ

В роботах [1,2] вивчались властивості власних значень задачі трансмісії за допомогою функціонально-дискретного методу (FD-метод). Спочатку досліджувалась базова задача трансмісії на власні значення з кусково-сталою апроксимацією коефіцієнтів диференціального рівняння. А потім на основі властивостей власних значень базової задачі і теорем про швидкість збіжності FD-методу були доведені відповідні властивості досліджуваної задачі. Зокрема, в роботі [1] було показано, що у випадку граничних умов Діріхле, на відміну від класичної задачі Штурма-Ліувілля, умова трансмісії може привести до появи таких пар сусідніх власних значень, що різниця між власними значеннями кожної пари не зростає з ростом порядкового номера, а прямує до постійної величини.

Дана робота є узагальненням робіт [1,2], і присвячена вивченню впливу умов трансмісії на властивості власних значень для різних граничних умов. Робота побудована наступним чином. В розділі 2 наведена постановка задачі трансмісії на власні значення з граничними умовами у загальному вигляді та описано алгоритм для знаходження чисельного розв'язку, використовуючи методику роботи [3]. Розділ 3 присвячений дослідженню впливу умов трансмісії на властивості відповідної базової задачі з постійними коефіцієнтами. На основі результатів розділу 3 і теорем про швидкість збіжності FD-методу, в розділі 4 доведені теореми про властивості власних значень досліджуваної задачі трансмісії.

1 Постановка задачі і чисельний алгоритм

Розглянемо наступну задачу трансмісії на власні значення

$$\frac{d^2 u_i}{dx^2} + (\lambda - q(x))u_i = 0, \quad q \geq 0, \quad q \in L_\infty(0, 1), \quad (1)$$

$$x \in \Omega_i, \quad i = 1, 2 \quad \Omega_1 = (0, x^{(1)}), \quad \Omega_2 = (x^{(1)}, 1)$$

з умовами зшивки в точці $x^{(1)}$

$$\frac{du_i}{dx} \Big|_{x=x^{(1)}} = r[u(x^{(1)})], \quad r > 0, \quad i = 1, 2. \quad (2)$$

де $[f(x^{(1)})] = f_2(x^{(1)}) - f_1(x^{(1)})$ - стрибок функції в точці $x^{(1)}$.

Граничні умови запишемо у загальному вигляді

$$\alpha_i u_i(0) + \beta_i u_i'(0) + \gamma_i u_i(1) + \delta_i u_i'(1) = 0, \quad i = 1, 2. \quad (3)$$

Розглянемо гільбертові простори функцій $L_2 = L_2(\Omega_1) \times L_2(\Omega_2)$ та $W_2^1 = W_2^1(\Omega_1) \times W_2^1(\Omega_2)$ введені в роботах [1,2] і запишемо задачу (1)-(3) в операторному вигляді

$$(A + B)u - \lambda u = \theta,$$

де θ - нульовий елемент простору W_2^1 , а оператори A , B і апроксимуючий оператор $\bar{B}$ визначені наступним чином:

$$\langle Au, v \rangle = \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_i} \frac{du_i}{dx} \frac{dv_i}{dx} dx + r[u(x^{(1)})][v(x^{(1)})] - u_2'(1)v_2(1) + u_1'(0)v_1(0),$$

$$\langle Bu, v \rangle = \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_i} q u_i v_i dx, \quad \langle \bar{B}u, v \rangle = \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_i} \bar{q} u_i v_i dx$$

з областю визначення

$$D = \{(u_1, u_2) \in W_2^1 : \alpha_j u_j(0) + \beta_j u_j'(0) + \gamma_j u_j(1) + \delta_j u_j'(1) = 0, j = 1, 2,$$

$$\frac{du_i}{dx} \Big|_{x=x^{(1)}} = r[u(x^{(1)})], i = 1, 2, r > 0\}.$$

Тут $\bar{q}(x) \geq 0$ - кусково стала апроксимація функції $q(x)$.

Розглядатимемо такі набори параметрів в граничних умовах, при яких оператор A самоспряжений і додатньо визначений. Оператори B і $\bar{B}$ не негативно визначені. За таких умов чисельний розв'язок задачі (1)-(3) шукатимемо у вигляді [3]:

$$\lambda_n = \sum_{j=0}^m \lambda_n^{(j)}, \quad u_{ni} = \sum_{j=0}^m u_{ni}^{(j)}, \quad i = 1, 2, \quad (4)$$

де $\lambda_n^{(j)}$ та $u_{ni}^{(j)}$ знаходяться наступним чином. На нульовій ітерації $\lambda_n^{(0)}$ та $u_{ni}^{(0)}$ ($i = 1, 2$) - власні значення і відповідні власні функції базової задачі трансмісії з постійними коефіцієнтами

$$\frac{d^2 u_{ni}^{(0)}}{dx^2} + (\lambda_n^{(0)}(\bar{q}) - \bar{q}(x))u_{ni}^{(0)} = 0, \quad x \in \Omega_i, \quad i = 1, 2,$$

$$\left. \frac{du_{ni}^{(0)}}{dx} \right|_{x=x^{(1)}} = r[u_n^{(0)}(x^{(1)})], \quad (5)$$

$$\alpha_i u_{n1}^{(0)}(0) + \beta_i \frac{du_{n1}^{(0)}(0)}{dx} + \gamma_i u_{n2}^{(0)}(1) + \delta_i \frac{du_{n2}^{(0)}(1)}{dx} = 0, \quad i = 1, 2,$$

$$\|u_n^{(0)}\|_0 = 1.$$

Поправку власних функцій $u_n^{(j+1)}$ ($j = 0, 1, 2, \dots$) знаходимо як розв'язок відповідних неоднорідних задач трансмісії

$$\frac{d^2 u_{ni}^{(j+1)}}{dx^2} + (\lambda_n^{(0)}(\bar{q}) - \bar{q}(x)) u_{ni}^{(j+1)} = \sum_{s=0}^j \lambda_n^{(j+1-s)} u_{ni}^{(s)} + (q(x) - \bar{q}(x)) u_{ni}^{(j)} = -F_{ni}^{(j+1)}(x),$$

$$x \in \Omega_i, \quad i = 1, 2,$$

$$\left. \frac{du_{ni}^{(j+1)}}{dx} \right|_{x=x^{(1)}} = r[u_n^{(j+1)}(x^{(1)})], \quad (6)$$

$$\alpha_i u_{n1}^{(j+1)}(0) + \beta_i \frac{du_{n1}^{(j+1)}(0)}{dx} + \gamma_i u_{n2}^{(j+1)}(1) + \delta_i \frac{du_{n2}^{(j+1)}(1)}{dx} = 0,$$

$$(u_n^{(j+1)}, u_n^{(0)})_0 = 0, \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

А поправку власних значень $\lambda_n^{(j+1)}$ знаходимо з умови

$$\lambda_n^{(j+1)} = \lambda_n^{(j+1)}(\bar{q}) = ((q(x) - \bar{q}(x)) u_n^{(j)}, u_n^{(0)})_0. \quad (7)$$

2 Базова задача трансмісії на власні значення

Розглянемо базову задачу трансмісії (5) з $\bar{q} \equiv 0$. Оскільки ми розглядаємо набори параметрів в граничних умовах, при яких оператор A самоспряжений і додатньо визначений, то власні значення задачі (5) невід'ємні дійсні числа. Неважко переконатися в тому, що $\lambda_n^{(0)} = 0$ буде власним значенням базової задачі (5) за умови, що коефіцієнти в граничних умовах (3) задовольняють рівність

$$\left(1 + \frac{1}{r}\right) (\alpha_2 \gamma_1 - \alpha_1 \gamma_2) + \alpha_2 \beta_1 - \alpha_1 \beta_2 + \alpha_2 \delta_1 - \alpha_1 \delta_2 + \beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1 + \delta_1 \gamma_2 - \delta_2 \gamma_1 = 0. \quad (8)$$

Зокрема, ця умова виконується у випадку періодичних граничних умов $\delta_1 = -\beta_1$, $\gamma_2 = -\alpha_2$ та граничних умов Неймана на обох кінцях $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 1$.

Перейдемо до розгляду випадку $\lambda > 0$. Стандартним шляхом знаходимо, що власні значення базової задачі знаходяться з умови $f(\lambda_n^{(0)}) = 0$, де

$$f(\lambda_n^{(0)}) = (\alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1) [r \sin \sqrt{\lambda_n^{(0)}} + \sqrt{\lambda_n^{(0)}} \cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} x^{(1)} \cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (1 - x^{(1)})] +$$

$$+ \lambda_n^{(0)} (\beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1) [r \sin \sqrt{\lambda_n^{(0)}} - \sqrt{\lambda_n^{(0)}} \sin \sqrt{\lambda_n^{(0)}} x^{(1)} \sin \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (1 - x^{(1)})] +$$

$$\begin{aligned}
 & + \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1) \left[r \cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} - \sqrt{\lambda_n^{(0)}} \cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} x^{(1)} \sin \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (1 - x^{(1)}) \right] - \\
 & - \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1) \left[r \cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} - \sqrt{\lambda_n^{(0)}} \sin \sqrt{\lambda_n^{(0)}} x^{(1)} \cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (1 - x^{(1)}) \right] + \\
 & + \sqrt{\lambda_n^{(0)}} r [\alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1 + \gamma_1 \delta_2 - \gamma_2 \delta_1].
 \end{aligned}$$

Оскільки $f(\lambda_n^{(0)})$ – многочлен від $\sqrt{\lambda_n^{(0)}}$, то незалежні від r власні значення можуть існувати лише за умови рівності нулеві тригонометричних функцій в коефіцієнтах такого многочлена. Тому проаналізувавши випадки:

$$1) \quad \cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} x^{(1)} = \cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (1 - x^{(1)}) = 0;$$

$$2) \quad \sin \sqrt{\lambda_n^{(0)}} x^{(1)} = \sin \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (1 - x^{(1)}) = 0;$$

$$3) \quad \sin \sqrt{\lambda_n^{(0)}} x^{(1)} = \cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (1 - x^{(1)}) = 0;$$

$$4) \quad \cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} x^{(1)} = \sin \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (1 - x^{(1)}) = 0;$$

$$5) \quad \text{незалежні від } r \text{ власні значення не залежать від точки зшивки } x^{(1)},$$

отримаємо наступний результат.

Теорема 1. Якщо точка зшивки $x^{(1)} = \frac{2n+1}{2(n+k+1)}$, де $n, k \in \{0\} \cup N$, а коефіцієнти в граничних умовах (3) задовольняють умовам

$$\begin{cases} \beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1 = 0, \\ (-1)^{n+k} (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1 + \alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1) + \alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1 + \gamma_1 \delta_2 - \gamma_2 \delta_1 = 0, \end{cases} \quad (10)$$

то існують власні значення базової задачі (5) з $\bar{q} \equiv 0$, які не залежать від коефіцієнта зшивки r ,

$$\lambda_{n+k}^{(0)} = \pi^2 (n + k + 1)^2$$

а). Якщо при цьому

$$\begin{cases} (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1) x^{(1)} - (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1) (1 - x^{(1)}) = 0, \\ \alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1 = 0, \end{cases} \quad (11)$$

то незалежні від r власні значення можуть бути кратними.

б). Якщо крім умов (10) виконуються також умови

$$\begin{cases} (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1) x^{(1)} - (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1) (1 - x^{(1)}) = 0, \\ \alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1 \neq 0, \end{cases} \quad (12)$$

то різниця між незалежними від r власними значеннями і сусідніми прямує до постійної величини з ростом порядкового номера власного значення.

с). Якщо крім умов (10) має місце рівність

$$(\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1)x^{(1)} - (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1)(1 - x^{(1)}) \neq 0, \quad (13)$$

то різниця між будь-якими сусідніми власними значеннями зростає з ростом порядкового номера.

Доведення.

Якщо $x^{(1)} = \frac{2n+1}{2(n+k+1)}$, то з умови $\cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} x^{(1)} = \cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (1 - x^{(1)}) = 0$ отримаємо

$$\lambda_{n+k}^{(0)} = \pi^2(n+k+1)^2. \quad (14)$$

Оскільки для таких $\lambda_{n+k}^{(0)}$ визначник (9) набуде вигляду

$$f(\lambda_{n+k}^{(0)}) = -\lambda_{n+k}^{(0)} \sqrt{\lambda_{n+k}^{(0)}} (\beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1) + \\ + \sqrt{\lambda_{n+k}^{(0)}} r [(-1)^{n+k} (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1 - \alpha_1 \delta_2 + \alpha_2 \delta_1) + \alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1 + \gamma_1 \delta_2 - \gamma_2 \delta_1],$$

то незалежні від r власні значення (14) існуватимуть лише за умови (10) для параметрів в граничних умовах (3).

За виконання умов (10) визначник (9) набуде вигляду

$$f(\lambda) = (\alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1) [r \sin \sqrt{\lambda} + \sqrt{\lambda} \cos \sqrt{\lambda} x^{(1)} \cos \sqrt{\lambda} (1 - x^{(1)})] + \\ + r \sqrt{\lambda} (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1 - \beta_1 \gamma_2 + \beta_2 \gamma_1) (\cos \sqrt{\lambda} + (-1)^{n+k}) + \\ + \lambda [(\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1) \sin \sqrt{\lambda} x^{(1)} \cos \sqrt{\lambda} (1 - x^{(1)}) - (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1) \cos \sqrt{\lambda} x^{(1)} \sin \sqrt{\lambda} (1 - x^{(1)})].$$

Неважко переконатися в тому, що $f'(\lambda_{n+k}^{(0)}) = 0$ за умови (11), тобто в цьому випадку незалежні від r власні значення будуть кратними, що доводить пункт а).

Розглянемо асимптотику власних значень сусідніх з власними значеннями (14). Запишемо їх у вигляді

$$\sqrt{\lambda_{n+k+1}^{(0)}} = \frac{\pi(2n+1)}{2x^{(1)}} + \alpha_n = \frac{\pi(2k+1)}{2(1-x^{(1)})} + \alpha_n = \pi(n+k+1) + \alpha_n.$$

Скориставшись формулами тригонометричних перетворень та розвиненням в ряд Тейлора тригонометричних функцій, з умови $f(\lambda_{n+k+1}^{(0)}) = 0$ отримаємо рівняння для знаходження α_n :

$$\left(\frac{\pi(2n+1)}{2x^{(1)}} + \alpha_n \right)^2 (p\alpha_n + l\alpha_n^3 + O(\alpha_n^5)) + \left(\frac{\pi(2n+1)}{2x^{(1)}} + \alpha_n \right) (m\alpha_n^2 + v\alpha_n^4 + O(\alpha_n^6)) - \\ - ru(\alpha_n - \frac{1}{6}\alpha_n^3 + O(\alpha_n^5)) = 0, \quad (15)$$

де

$$p = (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1)x^{(1)} - (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1)(1 - x^{(1)}),$$

$$l = \frac{1}{6} [(\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1)(1 - x^{(1)})(3x^{(1)2} + (1 - x^{(1)})^2) - (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1)x^{(1)}(x^{(1)2} + 3(1 - x^{(1)})^2)].$$

$$m = (\alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1) x^{(1)} (1 - x^{(1)}) - \frac{1}{2} r (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1 + \alpha_2 \delta_1 - \alpha_1 \delta_2),$$

$$v = \frac{1}{24} r (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1 + \alpha_2 \delta_1 - \alpha_1 \delta_2) - \frac{1}{6} (\alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1) x^{(1)} (1 - x^{(1)}) (x^{(1)2} + (1 - x^{(1)})^2),$$

$$u = \alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1.$$

Представивши α_n у вигляді

$$\alpha_n = \frac{a}{(2n+1)} + \frac{b}{(2n+1)^2} + \frac{c}{(2n+1)^3} + \frac{d}{(2n+1)^4} + \frac{e}{(2n+1)^5} + O(n^{-6})$$

з (15) отримаємо вирази для знаходження невідомих констант.

$$\frac{\pi^2 p a}{4x^{(1)2}} = 0, \quad \frac{\pi^2 p b}{4x^{(1)2}} = 0, \quad \frac{\pi^2 p c}{4x^{(1)2}} + \frac{\pi^2 l a^3}{4x^{(1)2}} + \frac{\pi(2p+m)a^2}{2x^{(1)}} - r u a = 0,$$

$$\frac{\pi^2 p d}{4x^{(1)2}} + \frac{3\pi^2 l a^2 b}{4x^{(1)2}} + \frac{\pi(2p-m)ab}{x^{(1)}} - r u b = 0,$$

$$\frac{\pi^2 p e}{4x^{(1)2}} + \frac{3\pi^2 l a(ac+b^2)}{4x^{(1)2}} + \frac{\pi(2p+m)(2ac+b^2)}{x^{(1)}} + \frac{\pi(2l+v)a^4}{2x^{(1)}} + (p+m+\frac{1}{6}ru)a^3 - r u c = 0.$$

Якщо $p = 0$, а $\alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1 \neq 0$, тобто виконується умова (12), то незалежні від r власні значення прості. Коефіцієнти знаходяться з рівнянь:

$$\frac{\pi^2 l}{4x^{(1)2}} a^2 + \frac{\pi m}{2x^{(1)}} a - r u = 0, \quad b = 0,$$

$$\frac{3\pi^2 l a^2 c}{4x^{(1)2}} + \frac{2\pi m a c}{x^{(1)}} + \frac{\pi(2l+v)a^4}{2x^{(1)}} + (m + \frac{1}{6}ru)a^3 - r u c = 0.$$

Звідси

$$a = \frac{2x^{(1)}}{\pi} \left(\sqrt{\frac{m^2}{4l^2} + \frac{ru}{l}} - \frac{m}{2l} \right).$$

Таким чином, різниця між незалежним від r власним значенням і сусіднім

$$\lambda_{n+k+1}^{(0)} - \lambda_{n+k}^{(0)} = \frac{a}{2n+1} \left(\frac{\pi(2n+1)}{x^{(1)}} + \frac{a}{2n+1} \right) + O(n^{-2}) = \frac{\pi a}{x^{(1)}} + O(n^{-2})$$

прямує до постійної величини з ростом порядкового номера, що і доводить б).

Зокрема, для умов Діріхле $\alpha_1 = \gamma_2 = 1$ отримаємо

$$\lambda_{n+k+1}^{(0)} - \lambda_{n+k}^{(0)} = \frac{2r}{\pi x^{(1)}(1-x^{(1)})} + O(n^{-2}).$$

Якщо $p \neq 0$, тобто виконується умова (13), то $a = b = c = d = 0$. Це означає, що незалежні від r власні значення (14) або кратні, або різниця між коренями сусідніх власних значень $\alpha_n = \sqrt{\lambda_{n+k+1}^{(0)}} - \sqrt{\lambda_{n+k}^{(0)}}$ не прямує до 0 з ростом порядкового номера. Оскільки за умови (13) незалежні від r власні значення прості, то в такому випадку різниця між будь-якими сусідніми власними значеннями зростає з ростом порядкового номера, що доводить с).

Зокрема, це справедливо для умов Івонкіна-Самарського $\alpha_1 = 1, \beta_2 = 1, \delta_1 = -1$ і $x^{(1)} = \frac{2n+1}{4(k+1)}$, де $n + k = 2m + 1$.

Теорему 1 доведено.

Аналогічним чином можна довести Теореми 2 і 3.

Теорема 2. Якщо точка зшивки $x^{(1)} = \frac{n}{n+k}$, де $n, k \in N$, а коефіцієнти в граничних умовах (3) задовольняють умовам

$$\begin{cases} \alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1 = 0, \\ (-1)^{n+k}(\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1 - \beta_1 \gamma_2 + \beta_2 \gamma_1) + \alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1 + \gamma_1 \delta_2 - \gamma_2 \delta_1 = 0, \end{cases} \quad (16)$$

то існують власні значення базової задачі (5) з $q \equiv 0$, які не залежать від коефіцієнта зшивки τ .

a). Якщо при цьому виконуються умови

$$\begin{cases} \beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1 \neq 0, \\ (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1)x^{(1)} - (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1)(1 - x^{(1)}) + \tau(\beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1) = 0, \end{cases} \quad (17)$$

то незалежні від τ власні значення можуть бути кратними.

b). Якщо крім умов (16) виконуються також умови

$$\begin{cases} \beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1 \neq 0, \\ (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1)x^{(1)} - (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1)(1 - x^{(1)}) + \tau(\beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1) \neq 0, \end{cases} \quad (18)$$

то різниця між незалежними від τ власними значеннями і сусідніми прямує до постійної величини з ростом порядкового номера власного значення.

c). Якщо крім умов (16) мають місце рівності

$$\begin{cases} \beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1 = 0, \\ (\beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1)x^{(1)} - (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1)(1 - x^{(1)}) \neq 0, \end{cases} \quad (19)$$

то різниця між будь-якими сусідніми власними значеннями зростає з ростом порядкового номера власного значення.

Теорема 3. Якщо точка зшивки $x^{(1)} = \frac{2n-1}{2(n+k)+1}$, де $n, k \in \{0\} \cup N$, а коефіцієнти в граничних умовах (3) задовольняють умовам

$$\begin{cases} \alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1 = 0, \\ \alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1 + \gamma_1 \delta_2 - \gamma_2 \delta_1 = 0, \\ \tau(\beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1) + \beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1 = 0, \end{cases} \quad (20)$$

то існують власні значення базової задачі (5) з $q \equiv 0$, які не залежать від коефіцієнта зшивки τ . Вони прості.

a). Якщо при цьому

$$\beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1 \neq 0, \quad (21)$$

то різниця між будь-якими сусідніми власними значеннями зростає з ростом порядкового номера.

б). Якщо крім умов (20) виконуються також умови

$$\beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1 = 0, \quad (22)$$

то різниця між незалежними від τ власними значеннями і сусідніми прямує до постійної величини з ростом порядкового номера власного значення.

Приклади

1. Якщо на обох кінцях відрізка виконуються умови Неймана і $x^{(1)} = \frac{n}{n+k}$, $n, k \in N$, то виконуються умови Теорема 2.b.
2. Якщо задані умови Івонкіна-Самарського і $x^{(1)} = \frac{n}{2m}$, де $m \geq \left[\frac{n+1}{2}\right]$, то виконуються умови Теорема 2.c.
3. Якщо зліва задані умови Діріхле, а справа Неймана і $x^{(1)} = \frac{2n+1}{2(n+k)+1}$, $n, k \in \{0\} \cup N$, то виконуються умови Теорема 3.b.

Теорема 4. Якщо коефіцієнти в граничних умовах (3) задовольняють умовам

$$\begin{cases} \alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1 = 0, \\ \beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1 = 0, \\ \alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1 \neq 0, \\ \alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1 + \beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1 = 0, \\ \alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1 + \gamma_1 \delta_2 - \gamma_2 \delta_1 = \pm 2(\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1), \end{cases} \quad (23)$$

то існують власні значення базової задачі (5) з $\bar{q} \equiv 0$, які не залежать від коефіцієнта зшивки τ і точки зшивки $x^{(1)}$. Різниця між двома сусідніми власними значеннями зростає з ростом порядкового номера.

Доведення. Незалежні від $x^{(1)}$ власні значення можуть існувати за умови

$$\begin{cases} \alpha_1 \gamma_2 - \alpha_2 \gamma_1 = 0, \\ \beta_1 \delta_2 - \beta_2 \delta_1 = 0, \\ \alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1 + \beta_1 \gamma_2 - \beta_2 \gamma_1 = 0. \end{cases}$$

Тоді

$$\begin{aligned} f(\lambda_n^{(0)}) &= \sqrt{\lambda_n^{(0)}} \tau [2(\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1) (\cos \sqrt{\lambda_n^{(0)}} + \alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1 + \gamma_1 \delta_2 - \gamma_2 \delta_1) - \\ &\quad - \lambda_n^{(0)} (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1) \sin \sqrt{\lambda_n^{(0)}}]. \end{aligned}$$

Отже, незалежні від τ і $x^{(1)}$ власні значення існуватимуть, якщо

$$\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1 \neq 0 \quad \text{і} \quad \alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1 + \gamma_1 \delta_2 - \gamma_2 \delta_1 = \pm 2(\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1).$$

За умови $\alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1 + \gamma_1 \delta_2 - \gamma_2 \delta_1 = -2(\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1) \neq 0$

$$f(\lambda_n^{(0)}) = -4 \sqrt{\lambda_n^{(0)}} (\alpha_1 \delta_2 - \alpha_2 \delta_1) \sin \frac{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}{2} \left(\tau \sin \frac{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}{2} + \frac{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}{2} \cos \frac{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}{2} \right)$$

Тоді незалежними від τ власними значеннями будуть

$$\lambda_n^{(0)} = 4\pi^2 n^2, \quad n = 0, 1, \dots$$

Зокрема, це справедливо для періодичних граничних умов $\gamma_1 = -\alpha_1 \neq 0$, $\delta_2 = -\beta_2 \neq 0$. Як і в [2], отримаємо наступну асимптотику залежних від τ власних значень

$$\sqrt{\lambda_{2n}^{(0)}} = \pi(2n - 1) + \frac{4\tau}{\pi(2n - 1)} + O(n^{-3}).$$

Звідси випливає, що різниця між сусідніми власними значеннями зростає з ростом порядкового номера.

За умови $\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1 + \gamma_1\delta_2 - \gamma_2\delta_1 = 2(\alpha_1\delta_2 - \alpha_2\delta_1) \neq 0$

$$f(\lambda_n^{(0)}) = 4\sqrt{\lambda_n^{(0)}} \cos \frac{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}{2} \left(\tau \cos \frac{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}{2} - \frac{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}{2} \sin \frac{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}{2} \right),$$

я незалежні від τ власні значення

$$\lambda_n^{(0)} = \pi^2(2n + 1)^2, \quad n = 0, 1, \dots$$

Зокрема, це справедливо для антиперіодичних умов $\gamma_1 = \alpha_1 \neq 0$, $\delta_2 = \beta_2 \neq 0$.

Асимптотика залежних від τ власних значень наступна

$$\sqrt{\lambda_{2n+1}^{(0)}} = 2\pi n + \frac{2\tau}{\pi n} + O(n^{-3}),$$

звідки випливає, що різниця між сусідніми власними значеннями зростає з ростом порядкового номера. Теорема 4 доведена.

3 Властивості власних значень задачі трансмісії

Використовуючи Теореми 1-4 і результат про швидкість збіжності FD-методу [3], можна отримати якісний результат про поведінку власних значень задачі трансмісії (1)-(3).

Теорема 5.

Нехай коефіцієнти в граничних умовах (3) задачі трансмісії на власні значення (1)-(3) такі, що відповідні оператори A , B , $\bar{B}$ самоспряжені, і оператор A додатньо визначений, а B , $\bar{B}$ невід'ємні. Тоді різниця між сусідніми власними значеннями задачі (1)-(3) визначається різницею між відповідними сусідніми власними значеннями базової задачі трансмісії (4).

Доведення. Скористаємось FD-методом (4)-(7) і запишемо різницю між сусідніми власними значеннями задачі (1)-(3) у вигляді

$$\lambda_{n+1} - \lambda_n = \lambda_{n+1}^{(0)}(\bar{q}) - \lambda_n^{(0)}(\bar{q}) + \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_{n+1}^{(j)}(\bar{q}) - \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_n^{(j)}(\bar{q}).$$

В силу збіжності FD-методу

$$\left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_n^{(j)}(\bar{q}) \right| \leq \|q - \bar{q}\|_{\infty} \frac{1}{1 - q_n},$$

де $q_n \leq \frac{4\|q-\bar{q}\|_\infty}{\min\{\lambda_{n+1}^{(0)}(\bar{q})-\lambda_n^{(0)}(\bar{q}), \lambda_n^{(0)}(\bar{q})-\lambda_{n-1}^{(0)}(\bar{q})\}}$. З цієї оцінки і нерівності

$$\lambda_n^{(0)}(0) + q_{\min} \leq \lambda_n^{(0)}(\bar{q}) \leq \lambda_n^{(0)}(0) + q_{\max}$$

отримаємо

$$\left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_n^{(j)}(\bar{q}) \right| \leq \|q-\bar{q}\|_\infty \left(1 + \frac{4\|q-\bar{q}\|_\infty}{\min\{\lambda_{n+1}^{(0)}(\bar{q})-\lambda_n^{(0)}(\bar{q}), \lambda_n^{(0)}(\bar{q})-\lambda_{n-1}^{(0)}(\bar{q})\} + q_{\min} - q_{\max}} \right) = c_n(\bar{q}),$$

де $c_n(\bar{q}) \rightarrow 0$ як $O(\|q-\bar{q}\|_\infty)$, оскільки $\bar{q} \rightarrow q$.

Отже, приходимо до оцінки

$$\begin{aligned} \lambda_{n+1}^{(0)}(0) - \lambda_n^{(0)}(0) - (q_{\max} - q_{\min} + c_n(\bar{q}) + c_{n+1}(\bar{q})) &\leq \lambda_{n+1} - \lambda_n \leq \\ &\leq \lambda_{n+1}^{(0)}(0) - \lambda_n^{(0)}(0) + q_{\max} - q_{\min} + c_n(\bar{q}) + c_{n+1}(\bar{q}). \end{aligned}$$

Звідси випливає, що при зростанні порядкового номера різниця між сусідніми власними значеннями задачі (1)-(3) веде себе таким же чином, як і різниця між відповідними власними значеннями базової задачі (5) з $\bar{q}(x) \equiv 0$. Теорема 5 доведена.

Наслідок. Нехай виконуються умови Теорему 5. Нехай також точка зшивки і коефіцієнти в граничних умовах (3) задовольняють одній з наступних вимог:

1. $x^{(1)} = \frac{2n+1}{2(n+k+1)}$, $n, k \in \{0\} \cup N$ і виконуються умови (10), (12);
2. $x^{(1)} = \frac{n}{n+k}$, $n, k \in N$ і виконуються умови (16), (18);
3. $x^{(1)} = \frac{2n+1}{2(n+k)+1}$, $n, k \in \{0\} \cup N$ і виконуються умови (20), (22).

Тоді існують такі пари сусідніх власних значень задачі (1)-(3), для яких різниця між сусідніми власними значеннями прямує до постійної величини з ростом порядкового номера власного значення.

Література

1. V.L.Makarov, N.O.Rossokhata, B.I.Bandurskii. Functional-discrete method with high order of accuracy for the eigenvalue transmission problem. *Comput. Math. Appl. Math.*, v.4(2004), pp.324-349.
2. V.L.Makarov, N.O.Rossokhata, B.I.Bandurskii. Functional-discrete method to solve eigenvalue transmission problem with periodic boundary conditions. *Comput. Math. Appl. Math.*, v.5(2005), pp..
3. V.L.Makarov. FD-method: the exponential rate of convergence. *J. Math. Scienc.*, v.104(1997), N6, pp.1648-1653.

Надійшла до редакції

УДК 517.5

Савкіна М.Ю.

Оцінювання параметрів моделі нелінійної сплайнової регресії: обчислювальні аспекти

Запропоновано алгоритм знаходження оцінки параметрів моделі нелінійної регресії, де функція регресії - лінійний сплайн на відрізку $[0, 1]$ з r вузлами. Розташування вузлів невідоме та підлягає оцінюванню.

Ключові слова: модель нелінійної сплайнової регресії, оцінка параметрів, метод прогонки

Savkina M. Yu.

Estimating of parameters of nonlinear spline regression model: the computational approach

The algorithm of finding of estimates of parameters of nonlinear regression model is proposed, where function of regression is linear spline on segment $[0, 1]$ with r knot points. The location of knot points isn't known and to be estimated.

Key Words: nonlinear spline regression model, estimate of parameters, sweep method

В деяких застосуваннях теорії обробки спостережень бажаний такий вибір регресійної моделі

$$y_i = g(t_i) + \xi_i, i = 0, 1, \dots, n, \quad (1)$$

де функція регресії $g(t)$ має вигляд

$$g(t) = \begin{cases} g_1(t, \vec{\beta}_1), & 0 \leq t \leq t_1^*, \\ g_2(t, \vec{\beta}_2), & t_1^* \leq t \leq t_2^*, \\ \vdots & \vdots \\ g_{r+1}(t, \vec{\beta}_{r+1}), & t_r^* \leq t \leq 1, \end{cases} \quad (2)$$

а $\{\xi_i, i = 0, 1, \dots, n\}$ - послідовність незалежних у сукупності випадкових величин з $E\xi_i = 0$ та $D\xi_i = \sigma^2$.

Як вказує Fuller в роботі [1], бажаною властивістю функції $g(t)$ є її неперервність та неперервність її першої похідної, а також те, щоб функції $g_1(t, \vec{\beta}_1), g_2(t, \vec{\beta}_2), \dots, g_{r+1}(t, \vec{\beta}_{r+1})$ були поліномами.

Якщо вектор точок з'єднання $\vec{t}^* = (t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*)$ відомий, то модель (1), (2) є лінійною по параметрах $\vec{\beta}_1, \vec{\beta}_2, \dots, \vec{\beta}_{r+1}$, і знайти їх оцінки можна, використовуючи методи множинної лінійної регресії. Якщо ж вектор $\vec{t}^*$ невідомий, то модель (1), (2) стає нелінійною, й оцінювання параметрів є більш скрутним.

Розглянемо випадок, коли функції $g_1(t, \vec{\beta}_1), g_2(t, \vec{\beta}_2), \dots, g_{r+1}(t, \vec{\beta}_{r+1})$ є лінійними, а $g(t)$ - неперервна. Тоді її можна подати у вигляді

$$g(t) = at + b + c_1(t - t_1^*)_+ + c_2(t - t_2^*)_+ + \dots + c_r(t - t_r^*)_+, \quad (3)$$

де

$$(t - t_j^*)_+ = \begin{cases} 0, & t - t_j^* \leq 0, \\ t - t_j^*, & t - t_j^* \geq 0. \end{cases}$$

Крім того, $t_i = \frac{i}{n}, i = 0, 1, \dots, n$. Область визначення параметрів функції $g(t)$ є множиною з простору R_{2r+2}

© М.Ю.Савкіна, 2004

$$V = \{(t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*, a, b, c_1, \dots, c_r), a, b, c_1, \dots, c_r \in R_1; 0 \leq t_1^* \leq t_2^* \leq \dots \leq t_r^* \leq 1\}.$$

Під оцінкою МНК розуміють таке значення вектора $\vec{\theta} = \{t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*, a, b, c_1, \dots, c_r\} \in V$, для якого сума квадратів відхилень

$$S^2(\vec{\theta}) = \sum_{i=0}^n (y_i - g(t_i))^2$$

набуває мінімального значення. $S^2(\vec{\theta})$ як функція від $\vec{\theta}$ набуває мінімального значення (якщо воно існує) або в своїй критичній точці, тобто в точці, де

$$\frac{\partial S^2}{\partial \theta} = 0, \theta \in V, \quad (4)$$

чи в точці, де похідна не існує, або в граничній точці області V .

Множину V можна подати у вигляді декартового добутку двох підмножин: $V_1 \times V_2$, $V_1 = \{(t_1^*, \dots, t_r^*), 0 \leq t_1^* \leq t_2^* \leq \dots \leq t_r^* \leq 1\}$ і $V_2 = \{(a, b, c_1, \dots, c_r)\}$. Зафіксуємо деяку точку $(t_1^*, \dots, t_r^*) \in V_1$, вилючаючи граничні точки області. Тоді система нормальних рівнянь (4) перетворюється в систему лінійних алгебраїчних рівнянь відносно $a, b, c_1, \dots, c_r$. Візьмемо останні $r+2$ рівняння; отримана система має єдиний розв'язок. Таким чином, вона визначає відображення ψ множини V_1 в множину V_2 . Очевидно, деякі точки з області V вигляду $(t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*, \psi(t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*))$ будуть критичними точками функції $S^2(\vec{\theta})$. Множину всіх точок вигляду $(t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*, \psi(t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*))$ позначимо через W . Множина W є необмеженою.

Розглянемо підмножину V_1^ϵ множини V_1 :

$$V_1^\epsilon = \{(t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*), \epsilon \leq t_1^* \leq t_2^* \leq \dots \leq t_r^* \leq 1 - \epsilon, |t_i^* - t_{i+1}^*| \geq \epsilon, i = 1, \dots, r-1\}.$$

В роботі [2] доведено, що для будь-якого $\epsilon > 0$ існує таке $C(\epsilon) > 0$, що якщо $\vec{t}^* \in V_1^\epsilon$, то $|\psi(\vec{t}^*)| < C(\epsilon)$.

Далі розглянемо множину $V^\epsilon = V_1^\epsilon \times V_2^\epsilon$, де $V_2^\epsilon = \{(a, b, c_1, \dots, c_r), |a| \leq C(\epsilon), |b| \leq C(\epsilon), |c_1| \leq C(\epsilon), \dots, |c_r| \leq C(\epsilon)\}$.

В тій самій роботі доведено, що оцінка МНК для регресії типу (3) існує в області V , тобто функція $S^2(\vec{\theta})$ досягає свого найменшого значення в області V , причому точка $\vec{\theta}^*$, в якій досягається найменше значення, належить перетину множин $V_1^{\frac{1}{n}}$ та W .

Зафіксуємо довільну точку $\vec{t}^* \in V_1^{\frac{1}{n}}$. Подамо функцію $g(t)$ в іншому вигляді

$$g(t) = \gamma_0 B_0(t) + \gamma_1 B_1(t) + \dots + \gamma_{r-1} B_{r-1}(t),$$

де

$$B_0(t) = \begin{cases} -\frac{1}{t_1^*}t + 1, & 0 \leq t \leq t_1^*, \\ 0, & t_1^* \leq t \leq 1, \end{cases}$$

$$B_1(t) = \begin{cases} \frac{1}{t_1^*}t, & 0 \leq t \leq t_1^*, \\ -\frac{1}{t_2^* - t_1^*}t + \frac{t_2^*}{t_2^* - t_1^*}, & t_1^* \leq t \leq t_2^*, \\ 0, & t_2^* \leq t \leq 1, \end{cases}$$

$$B_j(t) = \begin{cases} 0, & 0 \leq t \leq t_{j-1}^*, \\ \frac{1}{t_j^* - t_{j-1}^*} t - \frac{t_{j-1}^*}{t_j^* - t_{j-1}^*}, & t_{j-1}^* \leq t \leq t_j^*, \\ -\frac{1}{t_{j+1}^* - t_j^*} t + \frac{t_{j+1}^*}{t_{j+1}^* - t_j^*}, & t_j^* \leq t \leq t_{j+1}^*, \\ 0, & t_{j+1}^* \leq t \leq 1, \end{cases} \quad j = 2, \dots, r-1,$$

$$B_r(t) = \begin{cases} 0, & 0 \leq t \leq t_{r-1}^*, \\ \frac{1}{t_r^* - t_{r-1}^*} t - \frac{t_{r-1}^*}{t_r^* - t_{r-1}^*}, & t_{r-1}^* \leq t \leq t_r^*, \\ -\frac{1}{1 - t_r^*} t + \frac{1}{1 - t_r^*}, & t_r^* \leq t \leq 1, \end{cases}$$

$$B_{r+1}(t) = \begin{cases} 0, & 0 \leq t \leq t_r^*, \\ \frac{1}{1 - t_r^*} t - \frac{1}{1 - t_r^*}, & t_r^* \leq t \leq 1, \end{cases}$$

Позначимо

$$B = \begin{pmatrix} B_0(t_0) & B_1(t_0) & \dots & B_{r+1}(t_0) \\ B_0(t_1) & B_1(t_1) & \dots & B_{r+1}(t_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_0(t_n) & B_1(t_n) & \dots & B_{r+1}(t_n) \end{pmatrix}$$

Тоді для знаходження оцінки МНК вектора невідомих параметрів $\vec{\gamma} = (\gamma_0, \dots, \gamma_{r+1})$ маємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь[3]

$$(B'B)\vec{\gamma} = B'\vec{y}, \text{ де } \vec{y} = (y_0, y_1, \dots, y_n).$$

Перехід до іншого базису дозволяє зробити матрицю $B'B$ системи тридіагональною, яку можна розв'язати методом прогонки, що значно спрощує обчислювальну роботу. Маємо

$$B'B = \begin{pmatrix} b_{00} & b_{01} & 0 & \dots & 0 \\ b_{10} & b_{11} & b_{12} & \dots & 0 \\ 0 & b_{22} & b_{23} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & b_{rr} \end{pmatrix},$$

де

$$b_{00} = \sum_{i=0}^{n_1} \left(1 - \frac{i}{t_1^* n}\right)^2 = 1 + n_1 - \frac{n_1(n_1 + 1)}{n_1 + \epsilon_1 n} + \frac{n_1(n_1 + 1)(2n_1 + 1)}{6(n_1 + \epsilon_1 n)^2},$$

$$n_1 = [nt_1^*]_{t=t_1} = \frac{1}{n} \{nt_1^*\};$$

$$b_{01} = \sum_{i=0}^{n_1} \frac{1}{t_1^* n} \left(1 - \frac{i}{t_1^* n}\right)^2 = \frac{n_1(n_1 + 1)}{2(n_1 + \epsilon_1 n)} + \frac{n_1(n_1 + 1)(n_1 - 1)}{6(n_1 + \epsilon_1 n)^2},$$

$$\begin{aligned} b_{jj} &= \sum_{i=n_{j-1}+1}^{n_j} \left(\frac{1}{(t_j^* - t_{j-1}^*)n} - \frac{t_{j-1}^*}{t_j^* - t_{j-1}^*} \right)^2 + \sum_{i=n_j+1}^{n_{j+1}} \left(-\frac{1}{(t_{j+1}^* - t_j^*)n} + \frac{t_{j+1}^*}{t_{j+1}^* - t_j^*} \right)^2 = \\ &= \frac{n_j'}{(n_j' + \epsilon_j n - \epsilon_{j-1} n)^2} \left(\frac{(n_j' + 1)(2n_j' + 1)}{6} - \epsilon_{j-1} n(1 + n_j') + \epsilon_j^2 n^2 \right) + \end{aligned}$$

$$+ \frac{n'_{j+1}}{(n'_{j+1} + \epsilon_{j+1}n - \epsilon_j n)^2} \left(\frac{(n'_{j+1} - 1)(2n'_{j+1} - 1)}{6} - \epsilon_{j+1}n(1 - n'_{j+1}) + \epsilon_{j+1}^2 n^2 \right);$$

де $n_j = [nt_j^*]$, $\epsilon_j = \frac{1}{n} \{nt_j^*\}$, $n'_{j-1} = n_j - n_{j-1}$, $j = 1, \dots, r$;

$$b_{j,j-1} = \sum_{i=n_{j-1}+1}^{n_j} \left(\frac{i}{(t_j^* - t_{j-1}^*)n} - \frac{t_{j-1}^*}{t_j^* - t_{j-1}^*} \right) \left(-\frac{i}{(t_j^* - t_{j-1}^*)n} + \frac{t_{j-1}^*}{t_j^* - t_{j-1}^*} \right) =$$

$$= \frac{n'_j}{(n'_j + \epsilon_j n - \epsilon_{j-1} n)^2} *$$

$$* \left(\frac{(n'_j - 1)(n'_j + 1)}{6} + \frac{n}{2} (\epsilon_{j-1}(1 - n'_j) + \epsilon_j(1 + n'_j)) - \epsilon_{j-1}\epsilon_j n^2 \right);$$

$$b_{j,j+1} = \sum_{i=n_j+1}^{n_{j+1}} \left(\frac{i}{(t_{j+1}^* - t_j^*)n} - \frac{t_j^*}{t_{j+1}^* - t_j^*} \right) \left(-\frac{i}{(t_{j+1}^* - t_j^*)n} + \frac{t_j^*}{t_{j+1}^* - t_j^*} \right) =$$

$$= \frac{n'_{j+1}}{(n'_{j+1} + \epsilon_{j+1}n - \epsilon_j n)^2} *$$

$$* \left(\frac{(n'_{j+1} - 1)(n'_{j+1} + 1)}{6} + \frac{n}{2} (\epsilon_{j+1}(1 + n'_{j+1}) - \epsilon_j(n'_{j+1} - 1)) - \epsilon_{j+1}\epsilon_j n^2 \right);$$

$$b_{r,r+1} = \sum_{i=n_r+1}^n \left(\frac{i}{(1 - t_r^*)n} - \frac{t_r^*}{1 - t_r^*} \right)^2 =$$

$$= \frac{n'_{r+1}}{(n'_{r+1} - \epsilon_r n)^2} \left(\frac{(n'_{r+1} + 1)(2n'_{r+1} + 1)}{6} - \epsilon_r n(1 + n'_{r+1}) + \epsilon_r^2 n^2 \right);$$

$$b_{r,r+1} = \sum_{i=n_r+1}^n \left(\frac{i}{(t_{j+1}^* - t_j^*)n} - \frac{t_j^*}{t_{j+1}^* - t_j^*} \right) \left(-\frac{i}{1 - t_r^*} - \frac{t_r^*}{1 - t_r^*} \right)^2 =$$

$$= \frac{n'_{r+1}}{(n'_{r+1} - \epsilon_r n)^2} \left(\frac{(n'_{r+1} - 1)(n'_{r+1} + 1)}{6} + \frac{n}{2} \epsilon_r (n'_{r+1} - 1) \right).$$

Відзначимо, що матриця $B'B$ у випадку, коли $\vec{t}^* \in V_1^{\frac{1}{n}}$, має діагональну перевагу, тобто $|b_{jj}| > \sum_{i \neq j} |b_{ij}|$, $j = 0, 1, \dots, r+1$. Дійсно, позначимо $\gamma_j = b_{jj} - b_{j,j-1} - b_{j,j+1}$.
Маємо

$$\gamma_j = \frac{n'_j}{(n'_j + \epsilon_j n - \epsilon_{j-1} n)^2} *$$

$$* \left(\frac{(n'_j + 1)(n'_j + 2)}{6} - \frac{n}{2} (\epsilon_{j-1}(n'_j + 3) + \epsilon_j(1 + n'_j)) + \epsilon_{j-1}n(\epsilon_{j-1}n + \epsilon_j n) \right) +$$

$$+ \frac{n'_{j+1}}{(n'_{j+1} + \epsilon_{j+1}n - \epsilon_j n)^2} *$$

$$* \left(\frac{(n'_{j+1} - 1)(n'_j - 2)}{6} + \frac{n}{2} (\epsilon_{j+1}(n'_j - 3) + \epsilon_j(n'_j - 1)) + \epsilon_{j+1}n(\epsilon_{j+1}n + \epsilon_j n) \right).$$

Якщо $n'_j \geq 3$ та $n'_{j+1} \geq 3$ одночасно, то кожний з доданків в r_j буде додатним; в усіх інших випадках можна довести, що додатньою буде вся сума. Наприклад, якщо $n'_j = 1$ та $n'_{j+1} = 1$, то

$$\begin{aligned} r_j &= \frac{(n\epsilon_{j-1} - 1)(n(\epsilon_j + \epsilon_{j-1}) - 1)}{(n(\epsilon_j - \epsilon_{j-1}) + 1)^2} + \frac{n\epsilon_{j+1}(n(\epsilon_{j+1} + \epsilon_j) - 1)}{(n(\epsilon_{j+1} - \epsilon_j) + 1)^2} = \\ &= \frac{(1 + n\epsilon_j - n\epsilon_{j-1})^2 + n\epsilon_j(-3 - n\epsilon_j + 3n\epsilon_{j-1})}{(n(\epsilon_j - \epsilon_{j-1}) + 1)^2} + \frac{-n\epsilon_{j+1}(n(\epsilon_{j+1} - \epsilon_j) + 1) + 2(n\epsilon_{j+1})^2}{(n(\epsilon_{j+1} - \epsilon_j) + 1)^2} \\ &= 1 - \frac{3n\epsilon_j}{n\epsilon_j - n\epsilon_{j-1} + 1} + \frac{2(n\epsilon_j)^2}{(n\epsilon_j - n\epsilon_{j-1} + 1)^2} - \frac{n\epsilon_{j+1}}{n\epsilon_{j+1} - n\epsilon_j + 1} + \frac{2(n\epsilon_{j+1})^2}{(n\epsilon_{j+1} - n\epsilon_j + 1)^2} = \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{2}n\epsilon_j}{n\epsilon_j - n\epsilon_{j-1} + 1} \right)^2 + \\ &+ \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{2}n\epsilon_{j+1}}{n\epsilon_{j+1} - n\epsilon_j + 1} \right)^2 - \frac{n\epsilon_j}{n\epsilon_j - n\epsilon_{j-1} + 1} + \frac{n\epsilon_{j+1}}{n\epsilon_{j+1} - n\epsilon_j + 1}. \end{aligned}$$

Враховуючи, що $n\epsilon_{j-1} \leq n\epsilon_j \leq n\epsilon_{j+1} < 1$, маємо

$$\begin{aligned} r_j &> \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{2}n\epsilon_j}{n\epsilon_j - n\epsilon_{j-1} + 1} \right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{2}n\epsilon_{j+1}}{n\epsilon_{j+1} - n\epsilon_j + 1} \right)^2 + \\ &+ \frac{(n\epsilon_{j+1} - n\epsilon_j)(1 - n\epsilon_{j-1})}{(n\epsilon_j - n\epsilon_{j-1} + 1)(n\epsilon_{j+1} - n\epsilon_j + 1)} > 0. \end{aligned}$$

Аналогічно треба розглянути випадки: $n'_j = 1$ та $n'_{j+1} = 2$; $n'_j = 2$ та $n'_{j+1} = 1$; $n'_j = 2$ та $n'_{j+1} = 2$; $n'_j = 1$ та $n'_{j+1} \geq 3$; $n'_j \geq 3$ та $n'_{j+1} = 1$; $n'_j = 2$ та $n'_{j+1} \geq 3$; $n'_j \geq 3$ та $n'_{j+1} = 2$.

Візьмемо деяке число N кратне $n - 2$ та на V_1^N розглянемо множину точок $(\alpha_{j1}, \alpha_{j2}, \dots, \alpha_{jr})$, де

$$\begin{aligned} \alpha_{j1} &= \frac{1}{n} + \frac{j_1(n-2)}{nN}, j_1 = 0, \dots, \frac{N(n-r-1)}{n-2}; \\ \alpha_{j2} &= \frac{2}{n} + \frac{j_2(n-2)}{nN}, j_2 = j_1, \dots, \frac{N(n-r)}{n-2}; \end{aligned}$$

$$\alpha_{jr} = \frac{r}{n} + \frac{j_r(n-2)}{nN}, j_r = j_{r-1}, \dots, 1.$$

Розв'язавши низку систем лінійних алгебраїчних рівнянь, знаходимо всі точки вигляду $(\alpha_{j1}, \dots, \alpha_{jr}, \psi(\alpha_{j1}, \dots, \alpha_{jr}))$, а потім в кожній точці значення $S^2(\alpha_{j1}, \dots, \alpha_{jr}, \psi(\alpha_{j1}, \dots, \alpha_{jr}))$. Найменше з усіх отриманих значень $S^2(\theta_0)$ можна вважати наближеним значенням для мінімуму функції $S^2(\theta)$, а точку θ_0 , в якій воно досягається, наближенням для оцінки МНК. Для отримання кращого наближення треба збільшити N .

Література

1. Fuller W.A. Grafted polinomials as approximating function. //Australian journal of agricultural economics. - 1969. - Вып.13. - С.35-46.
2. Савкина М.Ю. Існування та слушність оцінки МНК параметрів однієї моделі нелінійної регресії. - 2005. - Препрінт. - 11 С.
3. Сиббер Дж. Линейный регрессионный анализ. - Москва: Мир, 1980. - 456 С.

УДК 517.988:519.71

Володимир В. Хлобистов*,
Тетяна М. Поповічева

Про операторну інтерполяцію та ідентифікацію нелінійних систем

Уточнено взаємозв'язок між інтерполяційними формулами типу Лагранжа і Ерміта для поліноміальних операторів в гільбертовому просторі та методом ортогональних моментів для ідентифікації поліноміальних систем. Отримано оцінки точності інтерполяції на прикладі ідентифікаційної задачі та визначено мінімальне число вхідних сигналів, що гарантує задану точність.

Ключові слова: інтерполяція, ідентифікація, поліноміальна система, математична модель, диференційований оператор, точність.

Volodimir V. Khlobystov*,
Tetyana M. Popovicheva

On operator interpolation and identification non-linear systems

It defined more exactly correlation between Lagrange and Hermite types interpolation formulas for polynomial operators in Hilbert space and an orthogonal moments method for identification of polynomial systems. It obtained estimates of interpolation accuracy on an example of an identification problem and determined a minimal number of input signals that guarantee of given accuracy.

Key Words: interpolation, identification polynomial system, mathematical model, differentiable operator, accuracy

*E-mail: khk@i.com.ua

Серед методів дослідження об'єктів невідомої структури значне місце посідає ідентифікація на основі інформації про значення вхідних та вихідних сигналів. Даний підхід можна трактувати як задачу наближення операторів у деяких функціональних просторах. Одним із способів розв'язування цієї задачі є операторна поліноміальна інтерполяція. Можливість наближення довільного неперервного оператора поліноміальним обґрунтована теоремами, аналогічними теоремі Вейерштрасса про наближення неперервної функції поліномами [1-3]. Крім того відомо, що математичні моделі багатьох систем можна подати операторними поліномами деякого степеня. Це пояснює актуальність та необхідність продовження як теоретичних так і прикладних досліджень об'єктів поліноміальної структури, зокрема, встановлення зв'язку між операторними інтерполяційними формулами та методами ідентифікації поліноміальних систем при детермінованих впливах. Загальний огляд теорії поліноміальних систем, а також деякі питання інтерполяції даних та системної ідентифікації подані, наприклад, в [4,5]. В [6] розглядається метод ортогональних моментів з наступним застосуванням схем виділення однорідних функцій для розв'язання задачі ідентифікації поліноміальних

функціональних систем. Як показано в [7], цей метод еквівалентний інтерполяційному на відповідній множині вузлів. Там же подано його узагальнення для поліноміальних операторів в гільбертовому просторі.

В даній статті уточнюється взаємозв'язок між поліноміальною операторною інтерполяцією лагранжевого типу на послідовності вузлів, запропонованій в [8], і ермітового типу [9] та методом ортогональних моментів для ідентифікації поліноміальних систем. Отримано оцінки точності інтерполяції на прикладі задачі ідентифікації в просторі $L_2(0, T)$ та визначено мінімальне число вхідних сигналів, що забезпечує задану точність. Розглянемо задачу ідентифікації нелінійної (поліноміальної) системи методом ортогональних моментів з наступним застосуванням схем виділення однорідних функцій [6]. Нехай математична модель системи, що ідентифікується, описується поліномом вигляду

$$P_p(x) = \sum_{j=0}^p \int_0^t \dots \int_0^t K_p(t, z_1, \dots, z_p) x(z_1) \dots x(z_p) dz_1 \dots dz_p, \quad t \in [0, T], \quad (1)$$

де $x \in L_2(0, T)$, а $K_p(t, z_1, \dots, z_p)$ – симетрична відносно змінних $z_1, \dots, z_p$ інтегрована з квадратом в області $\Omega_p = [0, T] \times \dots \times [0, T]$ функція – ядро системи p -го порядку, $K_p(t, z_1, \dots, z_p) = 0$ при $z_i > t$, $i = 1, p$. Ядра K_p підлягають визначенню. Математичну модель, в термінах якої здійснюється ідентифікація, отримуємо заміною вхідного сигналу $x(t)$ відрізком його ряду Фур'є за ортонормальним базисом $\{e(t)\}_{n=1}^{\infty}$ простору $L_2(0, T)$:

$$\begin{aligned} P_p^j(x) &= \sum_{n=0}^j \int_0^t \dots \int_0^t K_p(t, z_1, \dots, z_p) \prod_{i=1}^p \left[\sum_{n=1}^{\infty} (x, e_n) e_n(z_i) \right] dz_1 \dots dz_p = \\ &= \sum_{n=0}^j \left[\sum_{n_1=1}^{\infty} (x, e_{n_1}) \dots (x, e_{n_p}) \int_0^t \dots \int_0^t K_p(t, z_1, \dots, z_p) e_{n_1}(z_1) \dots e_{n_p}(z_p) dz_1 \dots dz_p \right] = \\ &= \sum_{n=0}^j \sum_{n_1=1}^{\infty} (x, e_{n_1}) \dots (x, e_{n_p}) u_{n_1 \dots n_p}^{(j)}, \end{aligned} \quad (2)$$

Тут $(\cdot, \cdot)$ – скалярний добуток в $L_2(0, T)$, а $\mu^{(j)} = \mu^{(j)}(t) = \int_0^t \dots \int_0^t K_p(t, z_1, \dots, z_p) e_1(z_1) \dots e_p(z_p) dz_1 \dots dz_p$ – ортогональні моменти ядер, які однозначно визначаються за допомогою схем виділення однорідних функцій за відомою реакцією системи на вхідні впливи w , $i = 0, N$, задані наступним чином: $w_0 = 0$, $w = e_{n_1} + e_{n_2} + \dots + e_{n_p}$, враховуючи повторення.

$1 \leq k \leq n, 1 \leq i_j \leq m, N = \sum_{k=1}^n C_{m+k-1}^k$. Цей метод знаходження ортогональних моментів $\mu_{i_1, \dots, i_p}^{(p)}$, описаний в [6], зводиться до деякої рекурентної процедури їх обчислень. З іншого боку, значення $\mu_{i_1, \dots, i_p}^{(p)}$ можна отримати, розв'язавши систему лінійних рівнянь

$$P'_n(w_i) = P_n(w_i), \quad i = \overline{0, N}, \quad (3)$$

а оскільки $\mu_{i_1, \dots, i_p}^{(p)}$ однозначно визначаються за рекурентною процедурою, що подана в [6], то матриця системи рівнянь (3) невироджена. Отже, розглянутий метод ідентифікації при побудові $P'_n(x)$ еквівалентний інтерполяційному з умовами (3) при відповідних вузлах інтерполяції $w_i, i = \overline{0, N}$.

Розглянемо тепер розв'язання інтерполяційної задачі типу Лагранжа за допомогою інтерполянта [10]. Нехай X, Y – гільбертові простори, Π_n – множина неперервних операторних поліномів $P_n: X \rightarrow Y$ степеня n вигляду

$$\Pi_n = \{P_n(x) = L_0 + L_1 x + L_2 x^2 + \dots + L_n x^n\}, \quad (4)$$

де $L_0 \in Y, L_k x^k: X \rightarrow Y$ – k -тий операторний степінь, що був отриманий із неперервної симетричної k -лінійної операторної форми $L_k(v_1, v_2, \dots, v_k): X^k \rightarrow Y$ при $v_1 = v_2 = \dots = v_k = x$. Зокрема, L_n може мати

вигляд $L_n(v_1, \dots, v_n) = \int_0^1 \dots \int_0^1 K_n(t, z_1, \dots, z_n) v_1(z_1) \dots v_n(z_n) dz_1 \dots dz_n, \quad t$ –

фіксоване, та, відповідно, $\mu_{i_1, \dots, i_p}^{(p)} = L_p(e_{i_1}, \dots, e_{i_p})$. Нехай задана система елементів $\{w_i\}_{i=0}^N \subset X$. В [10] показано, що операторний поліном вигляду

$$P_n^*(x) = \left\langle \tilde{P}_n, \Gamma_{N+1}^{-1} \sum_{i=0}^n \{(w_i, x)^i\}_0^N \right\rangle, \quad P_n(x) \in \Pi_n, \quad (5)$$

де $(\cdot, \cdot)$ – скалярний добуток в $X, \tilde{P}_n = (P_n(w_0), \dots, P_n(w_N)), \Gamma_{N+1}^{-1}$ – обернена матриця до матриці $\Gamma_{N+1} = \|\sum_{i=0}^n (w_i, w_i)^i\|_{i,j=0}^N, \quad 0^0 = 1, \quad \langle \vec{a}, \vec{b} \rangle = \sum_{i=0}^N a_i b_i,$

$\vec{a} = \{a_i\}_0^N \in Y^{N+1}, \vec{b} = \{b_i\}_0^N \in R^{N+1}$, задовольняє умовам

$$P_n^*(w_i) = P_n(w_i), \quad i = \overline{0, N},$$

та, отже, є інтерполяційним для $P_n \in \Pi_n$. Розкриваючи $\langle \cdot, \cdot \rangle$, формулу (5) можна привести до вигляду

$$P_n^*(x) = \sum_{i=0}^n \sum_{j_1, \dots, j_i=0}^n l_{i, j_1, \dots, j_i}(x, e_{j_1}) \dots (x, e_{j_i}). \quad (6)$$

Набір значень $l_{i, j_1, \dots, j_i}$ є розв'язком системи лінійних рівнянь

$$P_n^*(w_i) = P_n(w_i), \quad i = \overline{0, N}. \quad (7)$$

Порівнюючи (3) та (7), неважко помітити, що матриці цих систем співпадають. Отже, матриця системи (7) також невироджена та $\mu_{n-1}^{(1)} = l_{n-1}$.
Нами доведена

- **Теорема.** Інтерполянти $P_n'(x)$ в (2) та $P_n^*(x)$ в (6), що побудовані на множині вузлів w_i , $i = \overline{0, N}$, тотожно співпадають, тобто розв'язки задачі ідентифікації поліноміальних систем при детермінованих впливах методом ортогональних моментів [6] та задачі операторного інтерполювання [10] у функціональному просторі $L_2(0, T)$ еквівалентні.

Перейдемо до інтерполяційної задачі типу Ерміта [9] для поліноміальних операторів вигляду (4). У припущенні, що

$$\frac{1}{k!} P_n^{(k)}(0) v_1 \dots v_k = L_k(v_1, \dots, v_k),$$

де $L_k(v_1, \dots, v_k)$ – k -лінійна неперервна симетрична операторна форма, поліном P_n можна подати у вигляді

$$P_n(x) = P_n(0) + \frac{1}{1!} P_n'(0)x + \frac{1}{2!} P_n''(0)x^2 + \dots + \frac{1}{n!} P_n^{(n)}(0)x^n. \quad (8)$$

Тут $P_n^{(k)}(0)x^k$ – диференціал Гато k -го порядку оператора P_n в нулі. Неважко показати, що операторний поліном n -го степеня $P_n^{(m)}(x) \in \Pi_n$

$$P_n^{(m)}(x) = \sum_{k=0}^m \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^n \frac{1}{k!} P_n^{(k)}(0) e_{i_1} \dots e_{i_k}(x, e_{i_1}) \dots (x, e_{i_k}), \quad m \geq n, \quad (9)$$

який отримуємо при заміні аргументу в $P_n(x)$ відрізком його ряду Фур'є за системою $\{e_i\}_{i=1}^m$ з ортонормального базису в X , задовольняє інтерполяційним умовам типу Ерміта

$$P_n^{(k)}(0) e_{i_1} \dots e_{i_k} = P_n^{(k)}(0) e_{i_1} \dots e_{i_k}, \quad k = \overline{0, n}, \quad (10)$$

та є наближенням для $P_n(x)$ в (8). В [9] було доведено, що для поліноміальних операторів інтерполяційна інформація типу Лагранжа на множині вузлів w_i , $i = \overline{0, N}$, еквівалентна ермітовій (10) в сенсі визначення $L_k(e_{i_1}, \dots, e_{i_k})$. Отже, розв'язки задачі операторної інтерполяції типу Ерміта та задачі ідентифікації поліноміальних систем при детермінованих впливах методом ортогональних моментів з наступним застосуванням схем виділення однорідних функцій також еквівалентні, оскільки $\mu_{n-1}^{(1)} =$

$= \frac{1}{k!} P_n^{(k)}(0) e_{i_1} \dots e_{i_k} = L_k(e_{i_1}, \dots, e_{i_k})$. Таким чином, справедливо наступне

- **Твердження.** Задача ідентифікації поліноміальної системи $P_n \in \Pi_n$ може бути безпосередньо розв'язана методом ортогональних моментів на основі інформації про значення диференціала Гато k -го порядку для

P_n в нулі за напрямками ортонормальної системи із простору вхідних сигналів.

Дослідимо точність ідентифікації. Нехай X, Y – гільбертові простори (X – сепарабельний), μ – гауссова міра на X , перший момент якої дорівнює нулю, B – кореляційний оператор цієї міри ядерний та $\text{Ker} B = \emptyset$. Оснастимо множину Π_n в (4) скалярним добутком [10]

$$(P_1, P_2)_H = \sum_{k=0}^n \int_X \dots \int_X (L_k^{(1)}(v_1, \dots, v_k), L_k^{(2)}(v_1, \dots, v_k))_Y \mu(dv_1) \dots \mu(dv_k)$$

та нормою $\|P\|_H = (P, P)_H^{1/2}$. Тут $L_k^{(1)}, L_k^{(2)}$ – k -лінійні неперервні симетричні операторні форми, що відповідають поліномам $P_1, P_2 \in \Pi_n$, $(\cdot, \cdot)_Y$ – скалярний добуток в Y . Визначимо похибку ідентифікації системи (1) в цій метриці. В [7] та [11] для поліноміальних операторів отримано оцінки точності інтерполяційної формули типу Лагранжа (5) в метриці H та в метриці лінійного нормованого простору Y

$$\|P_n - P'_n\|_H < \left(\sum_{k=1}^n k^2 \|L_k\|^2 (Tr B)^{k-1} \sum_{j=k+1}^{\infty} q^j \right)^{1/2} < \left(\sum_{k=1}^n k^2 \|L_k\|^2 (Tr B)^k \right)^{1/2}, \quad (11)$$

$$\|P_n(x) - P'_n(x)\|_Y \leq \sum_{k=1}^n \|L_k\| \left[(\|x\| + \varepsilon_n(x))^k - \|x\|^k \right]. \quad (12)$$

Тут $\|L_k\|$ – традиційна норма k -лінійного оператора, $\{q^j\}_{j=1}^{\infty}$ – власні значення оператора B , $q \in (0, 1)$, $Tr B = \sum_{j=1}^{\infty} q^j = \frac{q}{1-q}$, $\varepsilon_n(x) = \left\| x - \sum_{j=1}^n (x, e_j) e_j \right\|$, $\{e_j\}_{j=1}^{\infty} \subset X$ – система власних ортонормальних елементів оператора B з власними значеннями q^j , $(\cdot, \cdot)$ – скалярний добуток в X , $\|x\| = (x, x)^{1/2}$.

В [9] оцінки (11), (12) було наведено для задачі операторної інтерполяції ермітового типу (9)

$$\|P_n - P'_n\|_H < \left[\sum_{k=1}^n \left(\frac{\|P_n^{(k)}(0)\|}{(k-1)!} \right)^2 (Tr B)^k q^m \right]^{1/2}, \quad q \in (0, 1). \quad (13)$$

$$\|P_n(x) - P'_n(x)\|_Y \leq \sum_{k=1}^n \frac{\|P_n^{(k)}(0)\|}{k!} \left[(\|x\| + \varepsilon_n(x))^k - \|x\|^k \right]. \quad (14)$$

Внаслідок еквівалентності розв'язків інтерполяційних задач типу Лагранжа (5) і Ерміта (9) та розв'язку задачі ідентифікації поліноміальних систем методом ортогональних моментів (2), похибку останнього можна визначити за допомогою оцінок точності відповідних інтерполяційних формул.

Нехай $X = L_2(0, T)$. Розглянемо при фіксованому $t \in [0, T]$ поліноміальну систему $P_n: X \rightarrow X$ вигляду

$$P_p(x) = K_0(t) + \int_0^t K_1(t, z) x(z) dz + \dots + \\ + \int_0^t \dots \int_0^t K_n(t, z_1, \dots, z_n) x(z_1) \dots x(z_n) dz_1 \dots dz_n, \\ K_p(t, z_1, \dots, z_n) = 0, z_i > t, i = \overline{1, p}, t \in [0, T],$$
(15)

де $K_p, p = \overline{0, n}$, – симетрична інтегрована з квадратом в Ω_p функція, для

якої $\|K_p\| = \left(\int_0^t \dots \int_0^t K_p^2(t, z_1, \dots, z_n) dz_1 \dots dz_n dt \right)^{1/2}$. Нехай $\{e_i\}_{i=1}^\infty$ –

ортонормальний базис в $L_2(0, T)$. Тоді, виходячи з (2), математична модель, в термінах якої виконується ідентифікація, описується операторним поліномом

$$P'_n(x) = \sum_{s=0, n, \dots, 2n-1} \sum_{j=1}^\infty (x, e_{s+j}) \dots (x, e_{s+j}) \mu_{s+j}^{(n)},$$
(16)

де $\mu_{s+j}^{(n)}(t) = \int_0^t \dots \int_0^t K_p(t, z_1, \dots, z_n) e_{s+j}(z_1) \dots e_{s+j}(z_n) dz_1 \dots dz_n$. В умовах

сформульованої задачі ідентифікації дамо оцінку похибки математичної моделі (15) в метриці простору H . Оскільки

$$\frac{\|P_n^{(n)}(0)\|}{p!} = \|L_p\| \leq \|K_p\|,$$
(17)

То, виходячи з (13), (17), маємо

$$\|P_n - P'_n\|_H < q^{m/2} M,$$

де $M = \left[\sum_{n=1}^\infty p^n \|K_n\|^2 (Tr B)^n \right]^{1/2}$. Для забезпечення точності ідентифікації $\varepsilon > 0$ достатньо обрати $m > 2 \log_2 (\varepsilon / M)$.

Нехай тепер $x(z)$ – непарна періодична з періодом $2T$ функція, k -та похідна якої має обмежену зміну V_k на $[-T, T]$. Нехай $\{v_i\}_{i=1}^\infty$ ортонормальний тригонометричний базис в $L_2(-T, T)$. Оцінимо похибку розв'язку (16) задачі ідентифікації в метриці лінійного нормованого простору Y . Неважко показати, що

$$\varepsilon_m^2(x) \leq \sum_{i=m+1}^\infty \frac{V_i^2}{\pi^2 (i^{k+1})^2} < \frac{V_k^2}{\pi^2} \frac{1}{2k+1} \frac{1}{m^{2k+1}} < \frac{V_k^2}{m^{2k+1}}.$$

Тоді, згідно (14),

$$\|P_n(x) - P'_n(x)\|_Y < \sum_{i=1}^\infty \|K_i\| \left[\left(\|v_i\| + \frac{V_i}{m^{k+1}} \right)^2 - \|x\|^2 \right].$$

Дана похибка буде менше заданого значення $\varepsilon > 0$ при $m \geq m_\varepsilon$, де m_ε мінімальне ціле число, що задовольняє нерівності

$$\sum_{j=1}^n \|K_j\| \left[\left(\|x\| + \frac{V_j}{m^{k+1/2}} \right)^n - \|x\|^n \right] < \varepsilon.$$

У випадку $n=2$ при умові $\|K_j\| \leq K = \text{const}$ значення m знаходимо в явному вигляді з нерівності

$$m = m(x) > \left(V_j / \sqrt{\left(\|x\| + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{\varepsilon}{K}} - \left(\|x\| + \frac{1}{2} \right) \right)^{2/(2k+1)}.$$

Література

1. Prenter P.M. A Weierstrass theorem for real separable Hilbert spaces // *Appl. Theory.* – 1970. – №3. – P. 341-351.
2. Istratescu V.I. A Weierstrass theorem for real Banach spaces // *Appl. Theory.* – 1977. – 19. – №2. – P. 118-122.
3. Даугавет И.К. О полиномиальном приближении операторов // *Вестник СПбГУ. Сер. I* – 1994. – вып.3 – №15. – С.23-26.
4. Porter W.A. Data interpolation, causality structure and system identification // *Inf. and Contr.* – 1975. – 29. – P. 217-233.
5. Porter W.A. An overview of polynomial system theory // *IEEE Proc. Special issue on system theory, January, 1976.* – P. 18-23.
6. Пупков К.И., Капалин В.И., Ющенко А.С. Функциональные ряды в теории нелинейных систем. – М.: Наука, 1976. – 448с.
7. Хлобыстов В. В., Кашпур Е. Ф. К задаче интерполирования полиномиальных операторов // *Кибернетика и системный анализ.* – 1996. – № 3. – С. 106 – 108.
8. Хлобыстов В.В. К вопросу о сходимости интерполяционных процессов в гильбертовом пространстве // *Кибернетика и системный анализ.* – 2000. – № 6. – С. 166 – 172.
9. Хлобыстов В.В., Поповичева Т.Н. Об интерполяционном приближении дифференцируемых операторов в гильбертовом пространстве // *Укр. мат. журн.* (в печати).
10. Макаров В. Л., Хлобыстов В. В., Янович Л. А. Интерполирование операторов. – Киев: Наук. думка, 2000. – 407 с.
11. Хлобыстов В. В., Кашпур Е. Ф. О точности полиномиального интерполирования в гильбертовом пространстве в случае возмущенных значений оператора в узлах // *Кибернетика и системный анализ.* – 2002. – № 1. – С. 168 – 173.

Надійшла до редакції 12.09.2005 р.

УДК 519.688

Денис В. Холод*

Dennis V. Kholod

**Технології та методи
розробки систем електронного
навчання**

**Technology and methodology of e-
learning system design**

Стаття розглядає методи розробки систем електронного навчання. Пропонується архітектура системи, платформа та інструментарій.

The article describes methods of development of e-learning system. The analysis is made at architecture, tools, standards and frameworks.

Ключові слова: .Net, Framework, Html, XML, Web-служби, Uml, проектування, взаємодія, сервісно орієнтовані системи.

Key Words: .Net framework, HTML, XML Web Services, UML, design, interoperability, service oriented systems.

*E-mail: kholod@unicyb.kiev.ua

Вступ

Новітні досягнення в галузі апаратного та програмного забезпечення полегшують роботу людини в різних сферах, а в деяких випадках і повністю її замінюють. Ця теза стосується і організації навчального процесу в університетах інститутах та школах. Останнім часом тема автоматизації навчального процесу та дистанційного навчання користується зростаючою популярністю серед освітян, науковців, спеціалістів в галузі інформаційних технологій. Велика кількість публікацій та програмних розробок з даної тематики, є прямим свідченням актуальності цього напрямку. Нажаль, на практиці, в навчальних установах використовується лише мала частина можливостей інформаційних технологій. Не торкаючись фінансових аспектів справи, спробуємо визначити основні фахові проблеми які гальмують процес впровадження тих або інших систем автоматизації.

На факультеті кібернетики, Київського національного університету імені Тараса Шевченка здійснюється значна кількість розробок в напрямку автоматизації навчального процесу., які реалізують механізми контролю знань, автоматизують різні етапи адміністративної діяльності, тощо. Але багато з них так і залишаються на стадії розробки, або ж використовуються лише вузьким колом користувачів.

Основною метою даної публікації є опис технології побудови системи яка дозволить поєднати існуючі навчальні та адміністративні програмні модулі в єдину систему та надасть потужні механізми підтримки, керування та модернізації системи.

Аналіз проблем та вимог

Технології розробки. Систему, яка проектується однією групою спеціалістів, важко стикувати з системою, яку розробляє інша група. Питання стоїть глибше ніж сумісність між різними платформами або системами керування базами даних. Можливість використання технологій COM, DCOM чи CORBA, які забезпечують взаємодію між незалежними програмними модулями, не дає потрібної прозорості інтеграції. Групи розробників мають напрацювати спільну архітектуру та інтерфейси для взаємодії. Для цього необхідно їх скоординувати, що часто зробити важко або взагалі неможливо. До того ж, зі спільних домовленостей часто випливає залежність від платформи чи інструментальних засобів. На шляху до розв'язку позначених проблем стоїть використання відкритих стандартів, які базуються на поширених мережевих протоколах.

Сьогодні широко використовується технологія Web-служб. Вона найбільш придатна слугувати механізмом зв'язку між різними програмними технологіями та платформами. На базі Web-служб створюються модулі, які є документованими незалежними компонентами з відкритим інтерфейсом. Модулі Web-служб можна порівняти з бібліотеками користувача в яких міститься набір функцій. Але на відміну від останніх, що зазвичай зберігаються на локальному комп'ютері (наприклад у вигляді dll файлів), модулі Web-служб розміщуються на Web сервері. Більшість сучасних апаратних та програмних платформ підтримують відкриті стандарти, на яких базується технологія Web-служб (HTTP, XML), тому можуть користуватися ними цими службами, а також забезпечувати власні Web-служби.

Процес розробки. Розглянемо типову ситуацію. Група інженерів займається розробкою системи. Після реорганізації, робота цього колективу над проектом завершується. Продовжити роботу має інша група, але досконало вивчити складний багатомодульний проект досить важко. Витрачається значний час на "втягування" в існуючий проект, а інколи приймається рішення почати розробку з чистого листа. В даній ситуації маємо коштовне витрачання часу, ризик так і не завершити проект, або отримати проект, що важко, або не можливо супроводжувати та вдосконалювати.

Використання Web-служб дозволяє отримати незалежні компоненти системи з відкритим, документованим інтерфейсом. Такі компоненти створюються за допомогою добре зарекомендованої технології об'єктно орієнтованого програмування, тому легко модернізуються та мають можливості повторного використання коду. Використання технології Web-служб дозволяє проектувати сервісно орієнтовані системи. В них кожна функція реалізується невеликим модулем, що виконує свою цільову функцію, а робота системи забезпечується за допомогою взаємодії компонентів один з одним.

Відкритий інтерфейс модулів дозволяє різним розробникам працювати над окремими функціями системи, до того ж використовувати різні програмні та апаратні платформи. Все це значно полегшує розвиток та підтримку системи.

Іншою важливою складовою системи є визначений та задокументований процес розробки. Світові лідери розробки програмного забезпечення мають настільки досконалий процес розробки, що можуть продовжувати проект, навіть у випадку часткової або повної заміни колективу розробників. Досягти таких показників на практиці дуже важко, але зробити процес розробки більш прозорим та передбачуваним реально. Для цього потрібно провести етапи аналізу та проектування, побудувавши модель системи з використанням UML, інтегрувати створену модель в потужне CASE середовище, та організувати процес розробки, спираючись на реальні ресурси та умови, що передбачені проектом.

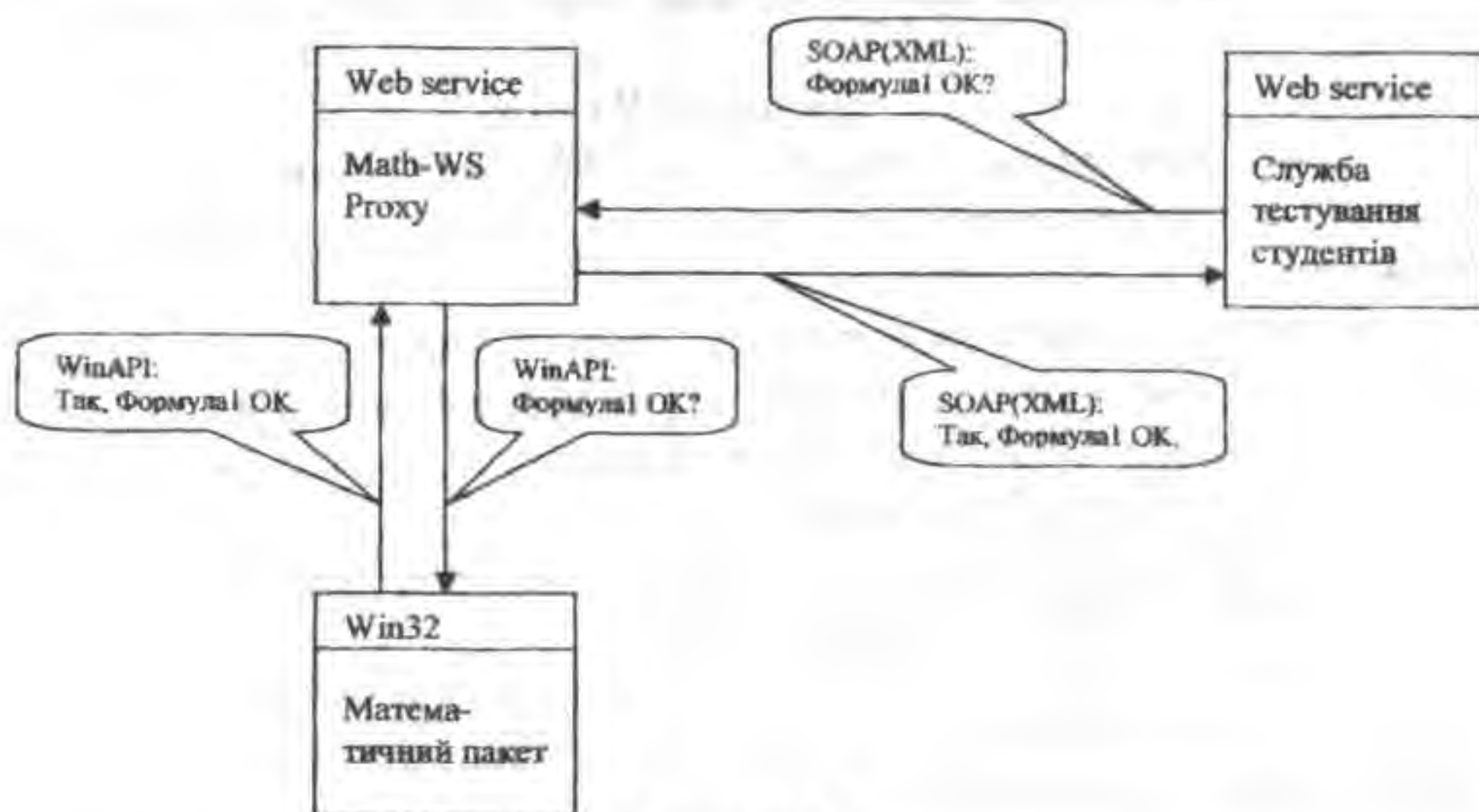
Прив'язка до платформи. Сучасна автоматизована система повинна забезпечити максимальну незалежність від апаратних чи програмних платформ. Бажано, щоб система працювала з персональними комп'ютерами та мобільними пристроями, які, в свою чергу можуть базуватися на різних операційних системах. Реалізувати таку функціональність можна за допомогою відкритих стандартів представлення та передачі даних. Прикладом таких стандартів можуть бути HTML – для представлення даних, XML, HTTP – для передачі даних. Основна мета якої бажано досягти це максимальне розмежування функціональності системи від клієнтського забезпечення.

Інтеграція існуючих рішень. Аналіз існуючих систем електронного навчання виходить за рамки цієї статті. Перерахуємо лише основні проблеми, пов'язані з їх використанням. Кожен навчальний заклад має власну структуру та принципи організації роботи. Введення в дію автоматизованої системи вимагає адаптації робочих процесів закладу до можливостей системи, або, навпаки адаптації інформаційної системи до вимог закладу. Виконання даних умов може бути складною задачею.



Малюнок 1.
Приклад взаємодії двох систем, що використовують технологію Web-служб

З іншого боку інтеграція окремих програмних пакетів до існуючої системи є дуже важливою. Перспектива не розробляти всі пакети власноруч, що потрібні для системи електронного навчання, є вкрай необхідною умовою. Якщо система навчання і необхідний пакет використовують технології Web-служб, то їхня інтеграція значно полегшується (малюнок 1).



Малюнок 2.

Приклад взаємодії двох систем, коли одна з систем не реалізована на базі Web-служби

Якщо ж система не використовує технології Web-служб — потрібно розробляти модулі, що виступатимуть в ролі перекладачів (проху). Для написання модуля перекладача, в більшості випадків, знадобляться поглиблені знання самих систем (малюнок 2).

Вибір платформи.

Основні питання, що вирішуються при розробці систем є вибір архітектури та відповідної платформи. На сьогоднішній день найбільш потужними платформами для реалізації системи є технологія .Net Framework від компанії Microsoft та Java Enterprise Edition компанії Sun Microsystems.

Остаточний вибір платформи залежить від власного досвіду розробників системи, переконань на користь тієї чи іншої компанії та загальної політики якої притримується організація, суб'єкт впровадження інформаційної системи.

Архітектура системи.

Більшість сучасних інформаційних систем побудовано на принципах архітектури, що складається з трьох рівнів. Перший рівень працює з даними системи. Серверами на цьому рівні зазвичай виступають системи керування базами даних. Другий рівень забезпечує роботу системи, повністю реалізуючи функціональність системи. На третьому рівні функціонують клієнтське програмне забезпечення. Даний підхід добре себе зарекомендував і гарно пристосований для реалізації системи на базі Web-служб.

Модель системи.

Отже розглянемо модель системи зображену на малюнку 4. Основними елементами моделі є локатори, служби системи та користувачі.

Локатори.

- *Призначення:* забезпечити клієнтів інформацією про ресурси системи. Надає переліки всіх ресурсів, загальну інформацію про визначений ресурс, місцезнаходження в мережі та необхідне клієнтське забезпечення.
- *Реалізація:* локатор реалізовано у вигляді Web-служби з власним Web інтерфейсом користувача.

В системі може бути декілька локаторів, що дозволяє розвантажити мережу, та скористатися іншими перевагами розподілених систем. В системі існує кореневий локатор, який відповідає за реєстрацію нових локаторів та синхронізацію між ними.

Служби системи. Складаються з сукупності служб на яких містяться ресурси системи. Ресурси можуть бути системними, або прикладними.

- *Призначення ресурсів:* забезпечити функціональність системи.
- *Реалізація:* побудовані на базі технології Web-служб. Системні ресурси не обов'язково повинні мати графічний інтерфейс, прикладні зазвичай його мають.

Користувачі системи. Клієнтське забезпечення можна умовно поділити на три групи:

1) Тонкі клієнти (thin client): зазвичай побудовані на базі Html, або термінальних систем, мають достатньо зручний та функціональний інтерфейс.

Переваги: не потрібно багато коштів, можна реалізувати на базі багатьох сучасних платформ;

Недоліки: може мати дещо обмежені можливості графічного інтерфейсу, більш повільніший.

2) Товстий клієнт (fat client): може використовувати ресурси операційної системи.

Переваги: швидкий, може має потужний графічний інтерфейс;

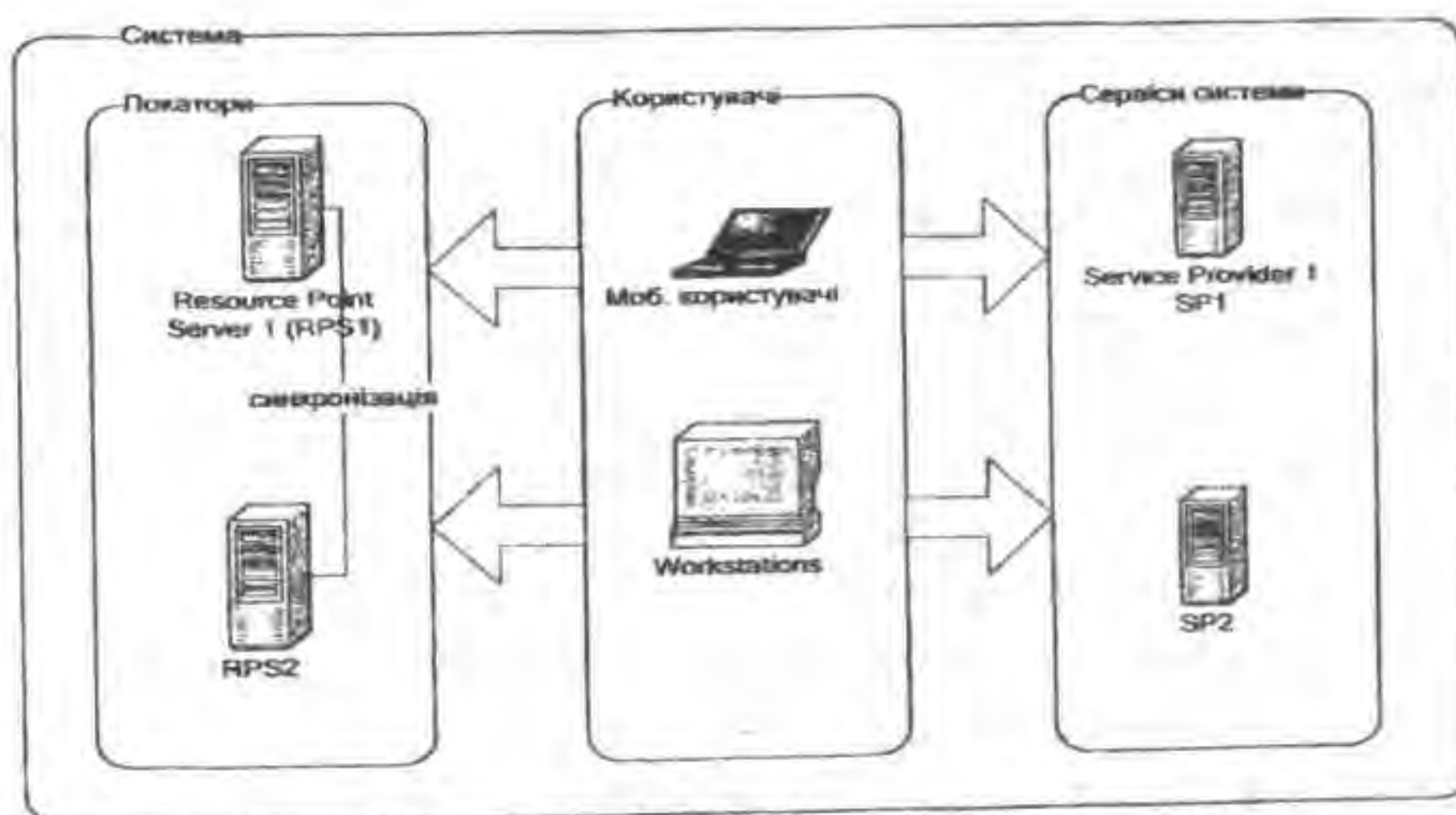
Недоліки: працює лише на тій платформі під яку розроблявся;

3) Розумний клієнт (smart client): сучасна альтернатива тонким та товстим клієнтам, водночас суміщає переваги обох підходів.

Недоліки: технології розробки та функціонування таких клієнтів ще не достатньо відпрацьовані.

Загальна схема роботи користувача з системою наступна:

1. Запит локатора про опубліковані ресурси системи. Для цього можна скористатися Web інтерфейсом, або клієнтом написаним для платформи, з якою працює користувач.
2. Підключення до необхідного ресурсу. Якщо ресурс має Web інтерфейс (thin client), користувач завантажує відповідну сторінку та працює, в іншому випадку користувач завантажує клієнтську програму (fat client або smart client) та працює з її графічним інтерфейсом.



Малюнок 4. Загальна схема системи

Системні служби забезпечують функціонування різних об'єктів системи, таких як користувачі, налаштування, політика безпеки та інше. Їх основне призначення забезпечити загальний інтерфейс системи.

Висновки.

Визначена модель забезпечує гнучкість системи. Окремі пакети можуть бути створеними різними групами розробників та інтегруватися до системи. Системні ресурси створюють фундамент системи, забезпечують однорідність, сумісність та взаємодію між різними ресурсами системи.

Для реалізації побудованої моделі пропонується обрати технологію .Net та програмні рішення компанії Microsoft. Вибір зумовлено тим, що при використанні даної платформи розробник забезпечується інструментами та засобами на всіх архітектурних рівнях системи.

- 1) Архітектурний рівень, що забезпечує роботу з даними: можливість використання серверу БД Microsoft SQL Server, каталогу Active Directory.
- 2) Прикладний рівень: потужні та легкі в використанні механізми створення Web-служб, засоби тестування та колективної розробки. Використання каталогу Active Directory та архітектури домену забезпечує механізми безпеки, обслуговування користувачів та служб системи.
- 3) Рівень клієнтського забезпечення: .Net Framework дозволяє швидко та зручно створювати та розгортати клієнтські додатки починаючи від тонких клієнтів закінчуючи розумними.

Для вирішення питань згаданих в розділі «Процес розробки» даної публікації, доцільно використати програмний пакет Visual Studio, який містить в собі потужні інструменти роботи для кожного з згаданих рівнів, а інтеграція Visual Studio з пакетом Microsoft Office System утворює потужне CASE середовище.

Інтеграція продуктів Sharepoint Portal та Microsoft Class Server, в систему вже на перших етапах розробки значно розширить її функціональність.

В описаній моделі використовуються технології Microsoft для побудови архітектури та основних служб системи, однак розробники інших платформ, які будують свої рішення на базі Web-служб, можуть інтегрувати їх до системи.

На останок звернемо увагу на той факт, що багато зі згаданих в публікації програмні рішення компанії Microsoft доступні навчальним закладам в межах підписки MSDN, яка коштує дешевше за аналогічну комерційну. Це дозволяє вільно використовувати серверні рішення та інструментальні засоби всім хто працює та навчається в закладі, тобто потенційним розробникам і користувачам системи електронного навчання.

Література

1. Джеф Просиз. Программирование для Microsoft .Net. Москва: Русская редакция, 2003.
2. Лешек А. Мацяшек. Анализ требований и проектирование систем. Разработка информационных систем с использованием UML. Москва: Вильямс, 2002.
3. Microsoft Systems architecture версія 2.0. Еталонні архітектури MSA. Київ: Майкрософт Україна.
4. Microsoft Systems architecture версія 2.0. Еталонні служби MSA. Київ: Майкрософт Україна.

Надійшла до редакції 04.10.2005

УДК 519.21

Михайло М. Шараров¹,

**Критерій існування граничного
значення степенів стохастичних
матриць**

*Пропонується новий метод
знаходження границі степенів
стохастичної матриці на базі
відповідного критерію*

*Ключові слова: Марківський
ланцюг, стохастична матриця,
граничний розподіл, границя степенів
стохастичної матриці*

¹ E-mail: sharapov@unicyb.kiev.ua

Michael M. Sharapov¹,

**Existing criterion of stochastic
matrixes powering limits**

*New and easy way of finding
stochastic matrixes powering limits is
considered*

*Key Words: Markow chain,
stochastic matrix, limit distribution,
stochastic matrix powering limit*

Ця стаття є логічним продовженням роботи [1], в якій було сформульовано необхідні умови існування граничного значення степенів стохастичних матриць, зокрема стверджувалось, що марківський ланцюг із матрицею ймовірностей переходів за один крок P , який є звідним і складається із поглинаючих та несуттєвих станів, має граничне значення $X = P^{(\infty)} = \lim_{n \rightarrow \infty} P^n$ степенів матриці P , яке знаходиться із такої системи:

$$\begin{cases} \forall i, j = \overline{1, n} & x_{ij} = \sum_{k=1}^n x_{ik} p_{kj} \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \forall i, j = \overline{1, n} & x_{ij} = \sum_{k=1}^n p_{ik} x_{kj} \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{cases} \forall i = \overline{1, n} & \sum_{j=1}^n x_{ij} = 1 \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} \forall i = \overline{1, n} & ((P^T)^{\infty})_{i\cdot} = e_i \Rightarrow (X^T)^{\infty} = e_i \end{cases} \quad (4)$$

В цій системі лінійних рівнянь невідомих більше, ніж рівнянь. Нашою метою буде, по-перше, спростити цю систему, а по-друге, довести достатність отриманої умови „граничності” матриці X .

Спочатку дещо перетворимо матрицю P ($n \times n$). Це буде зовсім тривіальне перетворення, а саме, поміняємо її рядки та стовпчики місцями так, щоб перш r рядків та, відповідно, перші r стовпчиків відповідали саме поглинаючим станам. Тоді, очевидно, матриця P ($n \times n$) набуде наступного виду:

$$P = \begin{pmatrix} E_r & O_{r,n-r} \\ A_{n-r,r} & B_{n-r,n-r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ p_{r+1,1} & p_{r+1,2} & \dots & p_{r+1,r} & p_{r+1,r+1} & p_{r+1,r+2} & \dots & p_{r+1,n} \\ p_{r+2,1} & p_{r+2,2} & \dots & p_{r+2,r} & p_{r+2,r+1} & p_{r+2,r+2} & \dots & p_{r+2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n,1} & p_{n,2} & \dots & p_{n,r} & p_{n,r+1} & p_{n,r+2} & \dots & p_{n,n} \end{pmatrix}^T \quad (*)$$

де E_r – одинична матриця $r \times r$, $O_{r,n-r}$ – нульова матриця $r \times (n-r)$, $A_{n-r,r}$ та $B_{n-r,n-r}$ – деякі матриці відповідних розмірностей, причому матриця $A_{n-r,r}$ не є нульовою.

Такий вигляд матриці P ($n \times n$) відразу тягне наступний вид шуканої матриці X ($n \times n$):

$$X = \begin{pmatrix} E_r & O_{r,n-r} \\ C_{n-r,r} & O_{n-r,n-r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ x_{r+1,1} & x_{r+1,2} & \dots & x_{r+1,r} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ x_{r+2,1} & x_{r+2,2} & \dots & x_{r+2,r} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n,1} & x_{n,2} & \dots & x_{n,r} & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

що в свою чергу тягне, по-перше – (1), по-друге – (4), по-третє – (3) для $i = \overline{1, r}$, по-четверте – (2) для $i = \overline{1, r}$, $j = \overline{1, n}$ та $i = \overline{r+1, n}$, $j = \overline{r+1, n}$. Таким чином вихідну систему можна спростити до наступного вигляду:

$$\begin{cases} (5) \\ x_j = p_j + \sum_{k=r+1}^n p_{kj} x_k \quad (i = \overline{r+1, n}, j = \overline{1, r}), \\ \sum_{j=1}^n x_j = 1 \quad (i = \overline{r+1, n}) \end{cases}$$

де запис в першому рядку означає тільки те, що тепер кількість невідомих зменшено згідно з (5), тобто тепер ми маємо $(n-r)r$ невідомих (елементи матриці $C_{n-r,r}$) та $(n-r)(r+1)$ лінійних рівнянь. Відзначимо, що всі описані спрощення разом із необхідністю „граничності”, доведеною в [1], все ще дозволяють стверджувати наявність розв’язків останньої системи, серед яких є і потрібний нам.

Очевидно, що підсистема $x_{ij} = \sum_{k=1}^n p_{ik} x_{kj}$ ($i = \overline{r+1, n}, j = \overline{1, r}$) може бути представлена у наступному матричному вигляді: $C_{n-r, r} = A_{n-r, r} + B_{n-r, n-r} C_{n-r, r}$, або, що те ж саме, у такому:

$$(E_{n-r} - B_{n-r, n-r}) C_{n-r, r} = A_{n-r, r},$$

яку, в свою чергу, розіб'ємо на наступні векторні рівності:

$$\forall j = \overline{1, r} \quad (E_{n-r} - B_{n-r, n-r}) C_{n-r, j}^{<j>} = A_{n-r, j}^{<j>}. \quad (6)$$

При кожному фіксованому $\forall j = \overline{1, r}$ рівність (6) є неоднорідною системою лінійних рівнянь із $n-r$ змінними та $n-r$ рівняннями.

Враховуючи стохастичність матриці P , можна стверджувати, що в системі (6) є „зайві” $n-r$ рівнянь, які завжди можна отримати однозначно з решти рівностей системи (6), тому $\forall i = \overline{r+1, n}$ можна вилучити довільну (але тільки одну) з рівностей для деякого $\forall j = \overline{1, r}$, наприклад, для $j = r$. Тоді для (5) маємо таку систему:

$$\begin{cases} x_{ij} = p_{ij} + \sum_{k=r+1}^n p_{ik} x_{kj} & (i = \overline{r+1, n}, j = \overline{1, r-1}) \\ \sum_{j=1}^r x_{ij} = 1 & (i = \overline{r+1, n}) \end{cases}, \quad (7)$$

в якій вже однакова кількість рівнянь і змінних, а саме $(n-r)r$. Знову відзначимо, що остання система має розв'язки, серед яких є і шуканий. Залишилось показати, що ця система має єдиний розв'язок. Дійсно, єдиність розв'язку випливає з того, що

$$\text{rang}(E_{n-r} - B_{n-r, n-r}) = n-r$$

(докладне пояснення цієї рівності є в [8] на стор. 361).

Таким чином ми довели наступний критерій:

Теорема (Критерій граничності) Якщо у однорідного скінченного марківського ланцюга з дискретним часом P – матриця ймовірностей переходів за один крок, представлена у вигляді (*), то гранична поведінка ланцюга (за „нескінченної” кількості кроків) визначається матрицею ймовірностей переходів (5), де елементи матриці $C_{n-r, r}$ визначаються системою однорідних лінійних рівнянь (7).

Три зауваження: по-перше, із (6) можна було $\forall i = \overline{r+1, n}$ виключати довільну з рівностей для деякого $\forall j = \overline{1, r}$. Якби ми виключили рівність не для $j = r$, а для іншого $\forall j = \overline{1, r}$, то отримали б систему, еквівалентну до (7). Таким чином ми насправді маємо r еквівалентних систем. По-друге, виключати можна було умову нормування і тоді замість (7) ми отримали б систему

$$x_{ij} = p_{ij} + \sum_{k=r+1}^n p_{ik} x_{kj} \quad (i = \overline{r+1, n}, j = \overline{1, r}), \quad (8)$$

яку з урахуванням (6) в матричному вигляді можна переписати так:

$$C_{n-r,r} = (E_{n-r} - B_{n-r,n-r})^{-1} A_{n-r,r} \quad (9)$$

причому існування оберненої матриці зумовлене вже згадуваною її невиродженістю. По-третє, у частковому вигляді (9) розв'язок нашої задачі іншими методами отримано, наприклад, в [10] (стор. 97) та в [11] (стор. 416-428).

Приклад 1 Для однорідного марківського ланцюга з матрицею ймовірностей переходів за один крок

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.0285 & 0.0568 & 0.275 & 0.0935 & 0.1029 & 0.082 & 0.052 & 0.0198 & 0.2895 \\ 0.1324 & 0.0532 & 0.14 & 0.0738 & 0.0823 & 0.2439 & 0.1868 & 0.0072 & 0.0854 \\ 0.2279 & 0.1876 & 0.2442 & 0.0249 & 0.0204 & 0.1018 & 0.1366 & 0.0374 & 0.0192 \\ 0.1632 & 0.1348 & 0.0182 & 0.121 & 0.147 & 0.0485 & 0.1553 & 0.1732 & 0.0388 \end{pmatrix}$$

згідно з критерієм граничності маємо, що поведінка ланцюга на нескінченності визначається матрицею $X = P^{(\infty)} = \lim_{n \rightarrow \infty} P^n$, яка є

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.13434 & 0.14058 & 0.37017 & 0.16677 & 0.18314 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.23184 & 0.13029 & 0.29953 & 0.15908 & 0.17926 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.28917 & 0.23244 & 0.33827 & 0.06952 & 0.0706 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.26613 & 0.21027 & 0.14696 & 0.17253 & 0.20411 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(на відміну від матриці P , елементи якої задамо точно, елементи матриці X наведені для простоти з точністю до п'яти знаків після коми).

Відзначимо, що наведений критерій цілком можна застосовувати і в тих випадках, коли суттєві класи представлені не тільки поглинаючими станами.

Приклад 2 Для однорідного марківського ланцюга з матрицею ймовірностей переходів за один крок

$$P = \left(\begin{array}{cc|ccc|cc} 1/3 & 2/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 2/7 & 0 & 5/7 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/6 & 1/3 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1/10 & 3/10 & 0 & 3/10 & 1/10 & 0 & 1/5 \\ 1/4 & 1/12 & 1/12 & 0 & 1/3 & 1/6 & 1/12 \end{array} \right)$$

спочатку зробимо таке перетворення: перші два стани, які, очевидно, утворюють суттєвий клас, тимчасово замінимо на поглинаючий стан і так само зробимо з наступними трьома станами. В результаті отримаємо новий ланцюг з такою матрицею ймовірностей переходів за один крок:

$$P_1 = \left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2/5 & 2/5 & 0 & 1/5 \\ 1/3 & 5/12 & 1/6 & 1/12 \end{array} \right). \quad \text{Застосувавши до } P_1 \text{ критерій граничності,}$$

$$\text{одержимо відповідну їй матрицю } X_1 = \left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 26/53 & 27/53 & 0 & 0 \\ 24/53 & 29/53 & 0 & 0 \end{array} \right). \quad \text{Застосувавши}$$

$$\text{той же критерій (чи просто ергодичну теорему) до } P_2 = \left(\begin{array}{cc} 1/3 & 2/3 \\ 3/4 & 1/4 \end{array} \right) \text{ та}$$

$$P_3 = \left(\begin{array}{ccc} 2/7 & 0 & 5/7 \\ 1/6 & 1/3 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{array} \right)$$

$$\text{отримаємо відповідно } X_2 = \left(\begin{array}{cc} 9/17 & 8/17 \\ 9/17 & 8/17 \end{array} \right) \text{ та } X_3 = \left(\begin{array}{ccc} 1/3 & 2/7 & 8/21 \\ 1/3 & 2/7 & 8/21 \\ 1/3 & 2/7 & 8/21 \end{array} \right).$$

І для того, щоб знайти матрицю $X = P^{(\infty)} = \lim_{n \rightarrow \infty} P^n$, залишилось застосувати формулу повної ймовірності:

$$x_{61} = \frac{26}{53} \cdot \frac{9}{17} = \frac{234}{901}, \quad x_{71} = \frac{24}{53} \cdot \frac{9}{17} = \frac{216}{901}, \quad x_{62} = \frac{26}{53} \cdot \frac{8}{17} = \frac{208}{901}, \quad x_{72} = \frac{24}{53} \cdot \frac{8}{17} = \frac{192}{901},$$

$$x_{63} = \frac{27}{53} \cdot \frac{1}{3} = \frac{9}{53}, \quad x_{73} = \frac{29}{53} \cdot \frac{1}{3} = \frac{29}{159}, \quad x_{64} = \frac{27}{53} \cdot \frac{2}{7} = \frac{54}{371}, \quad x_{74} = \frac{29}{53} \cdot \frac{2}{7} = \frac{58}{371},$$

$$x_{65} = \frac{27}{53} \cdot \frac{8}{21} = \frac{72}{371}, \quad x_{75} = \frac{29}{53} \cdot \frac{8}{21} = \frac{232}{1113}, \quad x_{66} = x_{67} = x_{68} = x_{69} = 0.$$

Остаточно маємо:

$$X = \begin{pmatrix} \frac{9}{17} & \frac{8}{17} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{9}{17} & \frac{8}{17} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{7} & \frac{8}{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{7} & \frac{8}{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{7} & \frac{8}{21} & 0 & 0 \\ \frac{234}{901} & \frac{208}{901} & \frac{9}{53} & \frac{54}{371} & \frac{72}{371} & 0 & 0 \\ \frac{216}{901} & \frac{192}{901} & \frac{29}{159} & \frac{58}{371} & \frac{232}{1113} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ЛІТЕРАТУРА

1. Шарапов М.М. „Відшукування граничних значень степенів стохастичних матриць та їх застосування”, *Вісник Київського університету*, серія фіз.-мат. науки, №4, 2004, ст. 272-277.
2. В.В. Анисимов, А.А. Война «Марковские и полумарковские процессы. Учебное пособие», Киев КГУ, 1986
3. А.Н. Ширяев «Вероятность», М. 1989.
4. И.Н. Коваленко, Б.В. Гнеденко «Теория вероятностей», Киев 1990.
5. В. Феллер «Введение в теорию вероятностей и ее приложения», т.1., М.1984.
6. Романовский В.И. «Дискретные цепи Маркова», М. 1949.
7. Романовский В.И. «О предельных распределениях для стохастических процессов с дискретным временем», Ташкент, 1946.
8. Гантмахер Ф.Р. «Теория матриц», 4 изд., 1988.
9. П. Ланкастер «Теория матриц», М. 1973.
10. Дж. Кемени, Дж. Снелл, А. Кнепп «Счетные цепи Маркова», Москва «Наука», 1987.
11. Charles M. Grinstead, J. Laurie Snell «Introduction to Probability», 2000.

Надійшла до редакції 20.09.2005

Ольга Ф. Швець¹

Побудова та дослідження збіжності
ітераційної схеми для апроксимації
вимірюваних сигналів на основі
методу псевдообернення

Ключові слова: апроксимація, час-
отно-фазові характеристики, опти-
мізація.

Olga F. Shvets¹

Construction and test for
convergence of the iterative scheme
for approximation of measurable
signals on the basis of a
pseudoinversion method

Key words: approximating, frequency-
phase characteristics, optimization.

¹ E-mail: olgasv@univ.kiev.ua

Проектуючи складні технічні системи, а також при розпізнаванні та класифікації образів і в інших прикладних областях необхідно проводити аналіз та обробку великих об'ємів інформації. Такі задачі не можливо розв'язати без розробки нових математичних ідей та чітко виписаних алгоритмів.

При обробці експериментальних даних, як правило, ставиться задача їх представлення в стисnutій формі і в залежності від параметрів. Такий процес відбувається за допомогою різних методів апроксимації вимірюваних сигналів. Часто такі сигнали апроксимуються в реальному часі по мірі їх надходження, тому, створюючи алгоритм, необхідно враховувати його швидкодію та робастність.

Стаття присвячена ітераційному алгоритму апроксимації даних, який ґрунтується на нових методах в області дослідження псевдообернених та проєкційних операторів [1-7]. Запропонована ітераційна схема полягає в тому, що для знаходження невідомих параметрів, при заданій системі лінійно-незалежних або структурно-заданих функцій, записується різницєва динамічна модель для їх уточнення по мірі надходження нової інформації.

В роботі запропоновано методику дослідження збіжності такої ітераційної процедури на основі другого методу Ляпунова.

Постановка задачі. Припустимо, що вимірюється скалярна величина $x(t) = g(t)$ в моменти $t_0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_N \leq T$, тобто маємо виміри

$$x_1 = g(t_1), x_2 = g(t_2), \dots, x_N = g(t_N). \quad (1)$$

Задача полягає в тому, щоб апроксимувати цю залежність $x = g(t)$, використовуючи систему лінійно-незалежних або структурно-заданих функцій

$$\varphi_1(t), \varphi_2(t), \dots, \varphi_N(t) \quad (2)$$

лінійними комбінаціями

$$x(t) \approx \sum_{i=1}^N \alpha_i \varphi_i(t). \quad (3)$$

Невідомі параметри $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ будемо визначати з умови (1), але при цьому необхідно враховувати, що дані надходять послідовно. Отже, для обчислення коефіцієнтів в (3) будемо розглядати систему рівнянь

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi_i(t_k) = x_k, \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (4)$$

де m може змінюватись від 1 до N , причому для досягнення мети не обов'язково використовувати всі виміри. З іншої сторони необхідно вивчити асимптотичні властивості такої апроксимації, тобто розглянути випадок, коли $N \rightarrow \infty$.

Алгоритм для розв'язування задач апроксимації. Перепишемо систему (4) в векторно-матричній формі. Для цього введемо наступні позначення

$$A^{(m)} = \begin{pmatrix} \varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \dots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \dots & \varphi_n(t_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_1(t_m) & \varphi_2(t_m) & \dots & \varphi_n(t_m) \end{pmatrix} - \text{відома матриця розмірності } m \times n,$$

$b^{(m)T} = (x_1, x_2, \dots, x_m)$ – m -вимірний вектор вимірюваних даних,

$\alpha^{(m)T} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ – вектор невідомих параметрів розмірності n .

Для визначення вектора $\alpha^{(m)}$ запишемо систему лінійних алгебраїчних рівнянь в матричній формі

$$A^{(m)} \alpha^{(m)} = b^{(m)}. \quad (5)$$

Тут і далі літерою T будемо позначати операцію транспонування.

Розв'язок системи (5) можна записати через псевдообернену матрицю $A^{(m)+}$ розмірності $n \times m$

$$\alpha^{(m)} = A^{(m)+} b^{(m)}. \quad (6)$$

Долучимо до розглянутої схеми (4) ще один вимір, тобто розглянемо $(m+1)$ -ше рівняння

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi_i(t_k) = x_k, \quad k = \overline{1, m+1}. \quad (7)$$

Система (7) у векторно-матричній формі матиме вигляд

$$A^{(m+1)} \alpha^{(m+1)} = b^{(m+1)}, \quad (8)$$

де $A^{(m+1)} = \begin{pmatrix} A^{(m)} \\ \alpha^{(m+1)T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{(m)} \\ \varphi_1(t_{m+1}) & \varphi_2(t_{m+1}) & \dots & \varphi_n(t_{m+1}) \end{pmatrix}$ – матриця розмірності $(m+1) \times n$,

$b^{(m+1)} = \begin{pmatrix} b^{(m)} \\ x_{m+1} \end{pmatrix}$ – m -вимірний вектор вільних членів, $\alpha^{(m+1)}$ – вектор шуканих параметрів розмірності n на $(m+1)$ -ій ітерації.

Розв'язок системи (8) можна записати через псевдообернену матрицю $A^{(m+1)+}$

$$\alpha^{(m+1)} = A^{(m+1)+} b^{(m+1)}. \quad (9)$$

Так як матриця $A^{(m+1)+}$ виражається через псевдообернені та проекційні матриці на m -ій ітерації, то для пошуку вектора невідомих параметрів можна записати ітераційну схему. Справедлива наступна теорема.

Теорема 1. Для корекції вектора невідомих параметрів при послідовному нарощуванні вимірюваних даних має місце ітераційна схема

$$\alpha^{(m+1)} = L^{(m)} \alpha^{(m)} + \psi^{(m)}, m = 1, 2, \dots \quad (10)$$

з наступними початковими умовами

$$\alpha^{(1)} = \frac{b^{(1)} A^{(1)T}}{A^{(1)} A^{(1)T}} = \frac{b^{(1)} a^{(1)T}}{a^{(1)} a^{(1)T}}. \quad (11)$$

Таким чином, для корекції параметрів ми записали лінійну різницеву схему (10). Суть доведення теореми полягає в тому, щоб представити матрицю $A^{(m+1)+}$ через матрицю $A^{(m)+}$, проекційні матриці $Z(A^{(m)})$ та $R(A^{(m)})$ на m -ій ітерації і підставити в (9).

В даній статті приведемо лише формули для обчислення матриці $L^{(m)}$ та вибору $\psi^{(m)}$ для двох випадків [5-7].

Випадок 1. Припустимо, що для матриці $A^{(m)}$ має місце співвідношення

$$a^{(m+1)T} Z(A^{(m)}) a^{(m+1)} > 0. \quad (12)$$

Тоді матриця $L^{(m)}$ та вектор $\psi^{(m)}$, розмірностей $n \times n$ та n відповідно, мають вигляд

$$L^{(m)} = \left(E_n - \frac{Z(A^{(m)}) a^{(m+1)} a^{(m+1)T} Z(A^{(m)})}{a^{(m+1)T} Z(A^{(m)}) a^{(m+1)}} \cdot a^{(m+1)T} \right), \quad (13)$$

$$\psi^{(m)} = \frac{Z(A^{(m)}) a^{(m+1)}}{a^{(m+1)T} Z(A^{(m)}) a^{(m+1)}} \cdot x_{m+1}, \quad (14)$$

де E_n – одинична матриця розмірності n .

Для цього випадку проекційні матриці $Z(A^{(m+1)})$ та $R(A^{(m+1)})$ обчислюються ітераційно за наступними формулами

$$Z(A^{(m+1)}) = Z \left(\begin{matrix} A^{(m)} \\ a^{(m+1)T} \end{matrix} \right) = Z(A^{(m)}) - \frac{Z(A^{(m)}) a^{(m+1)} a^{(m+1)T} Z(A^{(m)})}{a^{(m+1)T} Z(A^{(m)}) a^{(m+1)}}, \quad (15)$$

$$R(A^{(m+1)}) = R \left(\begin{matrix} A^{(m)} \\ a^{(m+1)T} \end{matrix} \right) = R(A^{(m)}) - \frac{Z(A^{(m)}) a^{(m+1)} a^{(m+1)T} R(A^{(m)})}{a^{(m+1)T} Z(A^{(m)}) a^{(m+1)}} - \frac{R(A^{(m)}) a^{(m+1)} a^{(m+1)T} Z(A^{(m)})}{a^{(m+1)T} Z(A^{(m)}) a^{(m+1)}} + \frac{Z(A^{(m)}) a^{(m+1)} a^{(m+1)T} Z(A^{(m)})}{(a^{(m+1)T} Z(A^{(m)}) a^{(m+1)})^2} \cdot (1 + a^{(m+1)T} R(A^{(m)}) a^{(m+1)}). \quad (16)$$

Випадок 2. Якщо для матриці $A^{(m)}$ виконується рівність

$$a^{(m+1)T} Z(A^{(m)}) a^{(m+1)} = 0, \quad (17)$$

то матриця $L^{(m)}$ та вектор $\psi^{(m)}$ обчислюються за формулами

$$L^{(m)} = \left(E_n - \frac{R(A^{(m)}) a^{(m+1)} a^{(m+1)T} R(A^{(m)})}{1 + a^{(m+1)T} R(A^{(m)}) a^{(m+1)}} \right), \quad (18)$$

$$\psi^{(m)} = \frac{R(A^{(m)}) a^{(m+1)}}{1 + a^{(m+1)T} R(A^{(m)}) a^{(m+1)}} \cdot x_{m+1}. \quad (19)$$

Проекційні оператори в цьому випадку обчислюються наступним чином

$$Z(A^{(m+1)}) = Z\left(\frac{A^{(m)}}{a^{(m+1)T}}\right) = Z(A^{(m)}), \quad (20)$$

$$R(A^{(m+1)}) = R\left(\frac{A^{(m)}}{a^{(m+1)T}}\right) = R(A^{(m)}) - \frac{R(A^{(m)})a^{(m+1)}a^{(m+1)T}R(A^{(m)})}{1 + a^{(m+1)T}R(A^{(m)})a^{(m+1)}}. \quad (21)$$

За означенням, проєкційні матриці $Z(A)$ та $R(A)$ для матриці A визначаються за формулами

$$Z(A) = E_n - A^+ A, \quad R(A) = A^+ A^{+T}, \quad (22)$$

Згідно (22), для ітераційного обчислення матриць (15), (16) та (20), (21), необхідно спочатку підрахувати $Z(A^{(1)})$ та $R(A^{(1)})$ за формулами

$$Z(A^{(1)}) = Z(a^{(1)T}) = E_n - \frac{A^{(1)T} A^{(1)}}{(A^{(1)} A^{(1)T})^2} = E_n - \frac{a^{(1)} a^{(1)T}}{(a^{(1)T} a^{(1)})^2}, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} R(A^{(1)}) &= R(a^{(1)T}) = A^{(1)+} (A^{(1)+})^T = (a^{(1)T})^+ (a^{(1)T})^{+T} = \\ &= \frac{A^{(1)T}}{A^{(1)} A^{(1)T}} \cdot \frac{A^{(1)}}{A^{(1)} A^{(1)T}} = \frac{a^{(1)}}{a^{(1)T} a^{(1)}} \cdot \frac{a^{(1)T}}{a^{(1)T} a^{(1)}} = \frac{a^{(1)} a^{(1)T}}{(a^{(1)T} a^{(1)})^2}. \end{aligned} \quad (24)$$

Аналогічні ітераційні схеми уточнення параметрів $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ в (3) можна записати і для випадку, коли вилучається останній рядок матриці $A^{(m)}$. Різницеві рівняння типу (10) можна отримати і у випадку, коли вилучається чи додається останній стовпчик матриці $A^{(m)}$. Але при цьому треба мати на увазі, що розмірність невідомих параметрів змінюється. Подібні результати можна отримати і для тих випадків, коли додається чи вилучається рядок або стовпчик в будь-якому місці матриці $A^{(m)}$.

Дослідження збіжності ітераційної схеми. Запропоновану ітераційну схему (10) можна досліджувати на збіжність за допомогою аналога другого методу Ляпунова для різницевих рівнянь. При цьому вважатимемо, що $\bar{\alpha}$ – розв'язок нашої задачі, тобто $\alpha^{(m)} \rightarrow \bar{\alpha}$ при $m \rightarrow \infty$. Тоді заміною

$$\alpha^{(m)} = y^{(m)} + \bar{\alpha} \quad (25)$$

систему (10) можна записати у нових змінних

$$y^{(m+1)} = f^{(m)}(y^{(m)}), \quad m = 1, 2, \dots \quad (26)$$

Задача аналізу збіжності ітераційної процедури (10) буде еквівалентною дослідженню стійкості різницевої схеми (26). При цьому $y^{(m)} = 0, m = 1, 2, \dots$ називають незбуреним розв'язком.

Означення 1. Незбурений рух системи (26) називають стійким за Ляпуновим, якщо для будь-якого $\varepsilon > 0$ можна вказати таке $\delta(\varepsilon) > 0$, що на розв'язках системи (26) виконується нерівність $\|y^{(m)}\| < \varepsilon, m = 1, 2, \dots$ при умові $\|y^{(1)}\| < \delta$ (тут і далі під $\|y^{(m)}\|$ будемо розуміти евклідову норму вектора $y^{(m)}$).

Якщо, крім означення 1, на розв'язках системи (26) виконується умова $\lim_{m \rightarrow \infty} y^{(m)} = 0$ при $\|y^{(1)}\| < \delta$, то незбурений рух системи (26) називають асимптотично стійким за Ляпуновим.

Справедливі наступні теореми [8, 9].

Теорема 2. Нехай в області

$$Y_\rho = \{y^{(m)} : \|y^{(m)}\| < \rho\} \quad (27)$$

для системи різницевих рівнянь (26) можна вказати додатно визначену послідовність функцій Ляпунова $V_m(y^{(m)})$, $m = 1, 2, \dots$, а її перша різниця, на розв'язках розглянутої системи, буде недодатною, тобто

$$\Delta V_m = V_{m+1}(y^{(m+1)}) - V_m(y^{(m)}) = V_{m+1}(f^{(m)}(y^{(m)})) - V_m(y^{(m)}) \leq 0, \quad (28)$$

то незбурений розв'язок є стійким за Ляпуновим.

Теорема 3. Якщо ж при умовах попередньої теореми щодо послідовності функцій Ляпунова $V_m(y^{(m)})$, $m = 1, 2, \dots$ перша різниця ΔV_m , $m = 1, 2, \dots$ на розв'язках системи (26) є від'ємно визначеною, то незбурений розв'язок системи (26) є асимптотично стійким.

Необхідно відмітити, що для нашого випадку послідовність функцій Ляпунова можна вибирати у вигляді

$$V_m^{(1)} = y^{(m)T} B^{(m)} y^{(m)}, m = 1, 2, \dots, \quad (29)$$

де $B^{(m)}$ - деякі додатно визначені матриці.

Теорема 4. Якщо $\bar{\alpha}$ - розв'язок системи (4) для будь-якого m , то система різницевих рівнянь для збуреного руху, тобто відносно векторів $y^{(m)}$, буде мати вигляд

$$y^{(m+1)} = L^{(m)} y^{(m)}, m = 1, 2, \dots \quad (30)$$

Доведення сформульованої теореми проводиться шляхом підстановки (25) в (10) та врахування співвідношень

$$a^{(k)T} \bar{\alpha} = x_k, k = 1, 2, \dots, m, \dots \quad (31)$$

Таким чином, для цього випадку дослідження збіжності ітераційної процедури (10) при збурених початкових даних еквівалентно аналізу стійкості лінійної різницевої системи (30). Згідно принципу стиснених відображень Банаха різницева система (30) буде асимптотично стійкою, якщо

$$\|L^{(m)} y^{(m)}\| < \|y^{(m)}\|, m = 1, 2, \dots \quad (32)$$

Для конструктивної перевірки умов (32) можна скористатися наступною теоремою.

Теорема 5. Якщо $\bar{\alpha}$ задовольняє співвідношенням (31), то для асимптотичної збіжності ітераційної процедури (10) у цілому (для будь-яких початкових даних) повинна виконуватись одна з нерівностей:

$$\max_{j=1, 2, \dots, n} \sum_{i=1}^r |l_{ji}^{(m)}| < 1, m = 1, 2, \dots; \quad (33)$$

$$\max_{j=1, 2, \dots, n} \sum_{i=1}^r |l_{ji}^{(m)}| < 1, m = 1, 2, \dots; \quad (34)$$

$$\max_{i=1,2,\dots,n} \lambda_i(L^{(m)T} L^{(m)}) < 1, m = 1, 2, \dots, \quad (35)$$

де $\lambda_i(L^{(m)T} L^{(m)})$, $i = 1, 2, \dots, n$ - власні значення матриці $L^{(m)T} L^{(m)}$, $L^{(m)} = \{l_{ij}^{(m)}\}_{i,j=1}^n$.

Доведення теореми 5 випливає з принципу стиснених відображень (32).

Фактично співвідношеннями (33)–(35) задаються умови, що відповідна норма оператора $L^{(m)}$ повинна бути меншою одиниці.

Література

1. Ахиезер Н.И. Лекции по теории аппроксимации. – М.: Наука, 1965. – 407 с.
2. Задирака В.К. Цифровая обработка сигналов. – К.: Наукова думка, 1993. – 294 с.
3. Алберт А. Регрессия, псевдоинверсия, рекуррентное оценивание. – М.: Наука, 1977. – 223 с.
4. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. – М.: Наука, 1967. – 287 с.
5. Кириченко Н.Ф. Аналитическое представление возмущений псевдообратных матриц // Кибернетика и системный анализ. – 1997. – № 2. – С. 98–107.
6. Кириченко Н.Ф. Псевдообращение матриц и их рекуррентность в задачах моделирования и управления // Проблемы управления и информатики. – 1995. – №1. – С. 114 – 127.
7. Кириченко Н.Ф., Лепеха Н.П. Псевдообращение в задачах управления и наблюдения // Автоматика. – 1993. – №5. – С. 69–81.
8. Кунцевич В.М., Лычак М.М. Синтез систем автоматического управления с помощью функций Ляпунова. – М.: Наука, 1977. – 400 с.
9. Мартынюк Д.И. Лекции по качественной теории разностных уравнений. – К.: Наукова думка, 1972. – 246 с.

Надійшла до редакції 18.10.2005

УДК 681.3

Олександр В. Шевченко*

Olexandr V. Shevchenko*

Підходи до здобування тематичної інформації із мережі Інтернет

Approaches to subject data Internet access

Розглядаються основні аспекти пошуку тематичної інформації в Інтернет. Проаналізовані можливості різних типів пошукових систем та запропоновано підхід до одержання тематичної інформації в Інтернет, базований на агентній технології.

Main aspects of Internet subject data search are considered. Different type search engine features are analyzed. Based on agent technology approach to Internet subject data search is proposed.

Ключові слова: Інтернет, інформація, пошук, релевантність, агенти.

Key Words: Internet, information, search, relevance, agents.

*E-mail: sheva@unicyb.kiev.ua

Вступ

Інтернет містить гігантський обсяг інформації і кожні три місяця ця інформація подвоюється [1,2], це, однак, створює проблему знаходження потрібних ресурсів, коли невідомі адреси їх розташування. Розподілена глобальна мережа містить усе інформаційне багатство сучасного суспільства, а ефективне і повне його використання постійно ускладнюється.

Оскільки Інтернет використовує різноманітні ресурси і різні методи доступу до цих ресурсів, то системи пошуку документів по ключовим словам, авторам, тематиці постійно доповнювалися можливостями більш складних тематичних запитів. Такі системи надавали розподілений доступ до документів, що розташовані на Веб-серверах, на місцевих і віддалених серверах, до яких був можливий доступ через мережу. Для посилення на документи різних серверів створюються каталоги, як правило, спеціалізовані і структуровані по темах. Доступ до цих каталогів забезпечується шляхом вибору окремих тем із конкретних розділів. Складна, різноманітна структура даних і різноманітність методів доступу до них створює нові проблеми, пов'язані з необхідністю отримання по запиту більш точної тематичної інформації.

Зазначені проблеми і роблять вкрай необхідною розробку нових механізмів, які спрощують пошук якісної тематично-орієнтованої і релевантної інформації.

1. Існуючі системи пошуку тематично-орієнтованої інформації в Інтернеті

Централізовані пошукові системи. Універсальні пошукові системи (ПС) мають попередників з обмеженими можливостями, що були орієнтовані на локальні сховища даних, але в цей час вони реалізують нові можливості як стосовно сховищ, так і методів доступу до них через Інтернет. База даних таких систем містить HTML-документи та їх індекси. До таких систем, наприклад, відносяться Alta Vista, Google, Yandex та інші [3].

Індекс забезпечує:

- розбір тексту нового документу, виділення ознак в даній предметній області і внесення їх в індекс;
- здобування тематичної інформації у БД,
- ранжирування результатів пошуку для відправки їх користувачу.

Ці задачі виконуються за допомогою браузера і мережного робота, що сканує Інтернет для пошуку нових і оновлених після індексації версій документів. Однак поступово централізовані ПС поступаються місцем децентралізованим. Так, наприклад, система Alta Vista індексує найбільшу частку Інтернет, але ця доля спадає з року в рік не через слабкі можливості ПС, а через швидке зростання обсягу документів.

З метою задоволення усіх потреб користувачів централізовані ПС включають в індекс усі доступні системи тематичних документів, хоча тематика індексованих документів змінюється дуже швидко і у широких межах. Крім того, система відповідно до заданих у запиті ключових слів подає велику кількість не релевантних документів і користувачу необхідно витратити зайвий час для їх розглядати. Тому останнім часом більш зручними є децентралізовані ПС.

Децентралізовані пошукові системи займають меншу частину ринку інформаційного пошуку в Інтернет, але вони швидко розвиваються. Такі ПС мають розподілену архітектуру, надають власникам нових тематичних областей реєстрацію індексів для доступу до них брокерів, по яким вони приймають рішення про відповідність індексу заданому запиту.

Базовими складовими цих систем є:

- тематичні індекси, що покривають тематичні області, які можуть належати різним власникам;
- тематичні мережні роботи, орієнтовані на визначену тематику, які забезпечують повноту представленої в індексі інформації тематичної області;
- брокери, які виконують оцінку тематичної належності запиту, вибір індексів та напрямку, в якому рухається запит;
- інформаційні агенти, що виконують впорядкування, перетворення та накопичення інформації із різних джерел мережі;

- інтерфейс користувача, що дозволяє спілкуватися комп'ютеру користувача з глобальною мережею через механізм посилення запитів на отримання тематичної інформації;
- депозитарій, призначений для зберігання усієї інформації базових складових ПС.

Функції мережного робота у таких системах спрощується, коли завантаження нових документів базується на посиланнях до раніше завантажених релевантних заданій тематиці документів. Мережний робот виконує фільтрацію релевантних документів і побудову фільтра релевантних документів з використанням раніше побудованого індексу, аналіз якого дозволяє встановити множину термів в опису тематичного індексу. Коли тематика далека від тематичного ядра власника, фільтр модифікується. Ця можливість дозволяє актуалізувати тематичну інформацію.

Під релевантністю в інформаційному пошуку розуміється семантична відповідність пари елементів, один із яких є запит, а інший – це документ, тобто відповідь на цей запит як документ в пошуковій документальній системі або як факт в інформаційній фактографічній системі.

Релевантність інформації має змістову та формальну форму. Перша з них розглядається як відповідність документа або фактографічного запису заданому запиту, який визначається неформально. При формальній формі - це відповідність, що встановлюється алгоритмічним шляхом для співставлення пошукового образу запиту з пошуковим образом документа в пошуковій системі або співставлення із фактографічним записом, сформованим пошуковою системою за допомогою критерію семантичної відповідності.

В автоматизованих пошукових системах формальна релевантність визначається шляхом відбору документів чи фактографічних записів, а також експертних оцінок виданої інформації і даних про ефективність інформаційного пошуку.

Прикладом децентралізованих ПС є розроблена компанією Fast Search & Transfer система [4], яка діє як масштабована архітектура і має швидкий алгоритм індексування тематичних масивів на серверах. Індекс включає до 80 млн. сторінок, кількість яких зростає до 200 млн. Слід також відзначити промислову систему Convera RetrievalWare, продукт компанії Convera Technologies Corp. Також існує декілька створених у Росії децентралізованих ПС серед яких найбільш цікавою і функціональною є пошукова машина Russian Context Server від компанії «Гарант-Парк-Интернет». Russian Context дозволяє враховувати морфологію російської та англійської мов, використовує SQL-подібну мову запитів з можливостями обмежень на контекст та атрибути документів [5]. Проведений аналіз сучасних централізованих та децентралізованих ПС

показує явні переваги децентралізованих ПС щодо можливостей, швидкості та правильності обробки запитів користувача при пошуку тематичної інформації.

2. Мультіагентні пошукові системи.

Починаючи з 90-х років швидко розвивається новий напрямок пошуку та обробки інформації у Інтернеті – інтелектуальні агенти [6]. До теперішнього часу існують різні визначення поняття агента. Спробуємо сформулювати загальні визначення, що орієнтовані на різні функції пошуку інформації у мережі.

Агент – це програма, яка повинна ефективно, надійно і коректно виконувати запити користувачів у мережі; може мати різні призначення і спеціалізації: агент користувача, інформаційний агент, агент-посередник, агент постачальник інформації, тощо.

Агент користувача - головна функція витягувати із інформаційного середовища потрібні для запиту користувача дані. В одержанні інформації йому допомагає агент-посередник.

Інформаційний агент вилучає інформацію із зовнішніх джерел, аналізує і маніпулює отриманою інформацією, формує відповідь та надсилає її користувачу або іншому агенту. До функцій цього агента відносяться:

- пошук інформації відповідно запиту;
- можливість автономного виконання частин завдань у запиті;
- можливість доставки отриманої інформації на комп'ютер користувача;
- фільтрацію потоків інформації тощо.

Цей агент адаптується до середовища, оброблює частково неточну та неповну інформацію, яка міститься у різних ресурсах мережі.

Агент-посередник забезпечує сервісні функції шляхом взаємодії з агентом користувачем і агентами постачальниками інформації; забезпечує доступ до БД або баз знань для формування відповіді на запит.

Агент-постачальник перетворює отриманий запит у стандартизовану форму, яку зрозуміє інформаційний ресурс мережі.

Різні типів агентів мають такі загальні властивості:

- самостійно працюють і контролюють свої дії,
- співпрацюють з іншими агентами;
- змінюють поведінку в залежності від стану зовнішнього середовища;
- мають можливість переходу до іншої платформи;
- видають достовірну інформацію тощо.

Прикладом автоматизації діяльності агентів є система Capot [7] орієнтована на роботу з БД у гетерогенному середовищі і отримання запитів з різних зовнішніх джерел та платформ.

Мультіагентна пошукова система (МАПС) виконує складні багаторазові запити, пов'язані з професійною діяльністю користувачів. Як правило, запити включають велику кількість ключових слів, які визначають область пошуку (20-30 слів). Різні агенти забезпечують більш швидко і точно подання релевантної відповіді на запит користувача [8]. Головною особливістю цієї моделі є проміжне середовище, яке виконує додаткові функції пошуку інформації для інформаційного агента, агента користувача та агента постачальника.

3. Висновки

В даній роботі розглянуто сучасну і дуже важливу проблему пошуку тематично-орієнтованої інформації у мережі Інтернет. Визначені основні аспекти пошуку інформації у мережі: релевантність документів відповідно запиту користувача, критерії якості щодо пошуку – повнота та точність. Дано огляд сучасних пошукових систем, особливе тих, що діють у мережі Інтернет і побудовані на базових математичних моделях пошуку та агентах.

Література

1. Банков В.Д. Интернет: поиск информации и продвижение сайтов. – СПб. Питер. – 2000. – 288с.
2. Курник А.П. Поиск в Интернет. - СПб. – Питер. – 2001. – 272с.
3. Куралев И.Е. Автоматическая классификация документов с использованием семантического анализа // Программирование, М.: 2000, № 4. – с31-41.
4. <http://www.fastsearch.com/>
5. Осипов Г.С., И.А. Тихомиров, И.В. Смирнов Интеллектуальный поиск в глобальных и локальных вычислительных сетях и базах данных. Труды международной конференции «Программные системы: теория и приложения», Переславль-Залесский, М.: Физматлит, 2004, т.2, с. 21-34
6. Huang Z., Eliens A., van Ballegooij A., de Bra P. A Taxonomy of Web Agents // IEEE Proc. of the First Intern. Workshop on Web Agent Systems and Applications (WASA 2000). - 2000.
7. <http://www.carrot-search.com/>
8. Морозов А.А., Обухов Ю.В. Разработка математического аппарата логического программирования интеллектуальных агентов Интернета // Искусственный интеллект. - 2002. - N4. - С. 580-587.

Надійшла до редакції 15.06.2005

РАДІОФІЗИКА

УДК 537.52; 533.9:537.872

Іда Л. Бабіч*, Анатолій М. Веклич*,
Лідія О. Крячко, Римма В. Мінакова

Ida L. Babich*, Anatoly M. Veklich*,
Lidiya A. Kryachko, Rimma V. Minakova

Дослідження електродугової плазми з домішками срібла

Investigation of the electric arc plasma with silver vapours

Методами оптичної спектроскопії одержані радіальні профілі температури та електронної концентрації в плазмі електричної дуги між електродами зі срібла та композиційного матеріалу Ag-Ni. Розрахований рівноважний склад плазми електродугового розряду. Встановлено, що вміст парів срібла у розрядному проміжку не перевищує 2%.

The radial profiles of the temperature and electron density in plasma of electric arc between silver electrodes or composition material Ag-Ni are obtained by optical spectroscopy techniques. The equilibrium mixture of electric arc discharge plasma is calculated. It was found, that contents of silver vapours in discharge gap does not exceed 2 %.

Ключові слова: електрична дуга, плазма, домішки срібла, локальна термодинамічна рівновага.

Key words: electric arc, plasma, silver vapours, local thermodynamical equilibrium.

*E-mail: ibabich@univ.kiev.ua, van@univ.kiev.ua, 29min@ipms.kiev.ua

Вступ

Широке застосування композиційних матеріалів у електронній промисловості знову відродило інтерес до дослідження плазми електродугового розряду між електродами з відповідних матеріалів. Вивчення параметрів дугової плазми зумовлене необхідністю оптимізації електротехнічних приладів, де має місце дуговий розряд.

Електричні та теплофізичні властивості срібла і композиційних матеріалів на його основі визначають їх широке застосування, особливо для контактів низьковольтної комутуючої апаратури.

У цій роботі вивчалась плазма електричної дуги, що вільно горить у повітрі, оскільки процеси, що мають в ній місце, можуть слугувати моделлю процесів між контактами пристроїв для перемикання електричних кіл.

Експеримент

Дуга запалювалась у повітрі між неохолоджуваними електродами. Діаметр циліндричних електродів дорівнював 6 мм. Міжелектродний проміжок – 4, 6 або 8 мм, розрядний струм – 30 А. У зв'язку з просторовою та часовою нестабільністю розряду застосовувався метод однократної томографічної реєстрації випромінювання спектральних ліній. Швидкісне сканування

просторових розподілів інтенсивності випромінювання забезпечувала ПЗЗ-лінійка (B/W) SONY ILX526A з 3000 пікселів. У комбінації зі спектральним приладом вона дозволяла виконувати записи радіального розподілу випромінювання у середньому перерізі розряду нестационарної дуги [1].

Структурні зміни в робочому шарі вивчалися металографічними методами за допомогою растрової мікроскопії мікрооб'ємів поверхні робочого шару та його перпендикулярного перерізу.

Результати та їх обговорення

На першому етапі досліджень визначались радіальні профілі температури $T(r)$ електричної дуги між срібними електродами за відносними інтенсивностями спектральних ліній AgI 520.9, 768.7, 827.3 нм та профілі електронної концентрації $N_e(r)$ – з ширини спектральної лінії AgI 466.8 нм, оскільки домінуючим механізмом її розширення є квадратичний ефект Штарка [2]. Результати цих вимірювань подані на рис. 1.

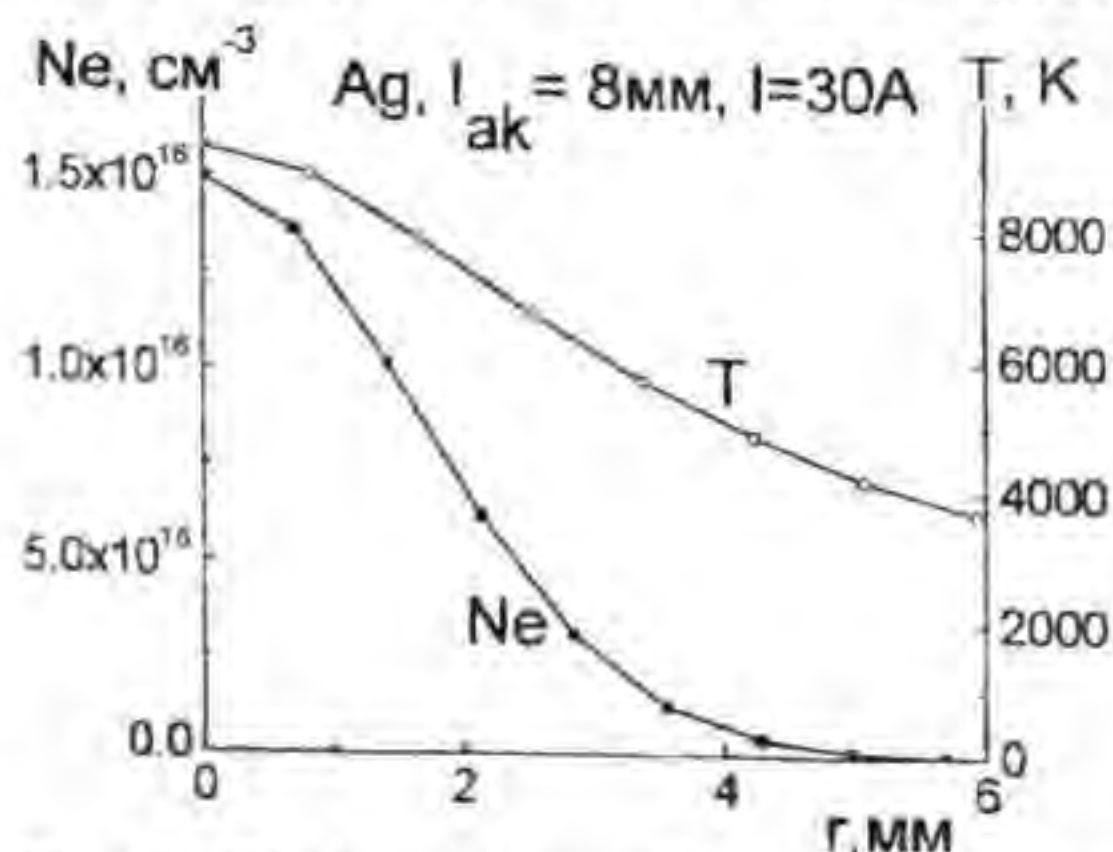


Рис.1. Радіальні профілі $T(r)$ та $N_e(r)$ плазми електричної дуги, що горить між срібними електродами

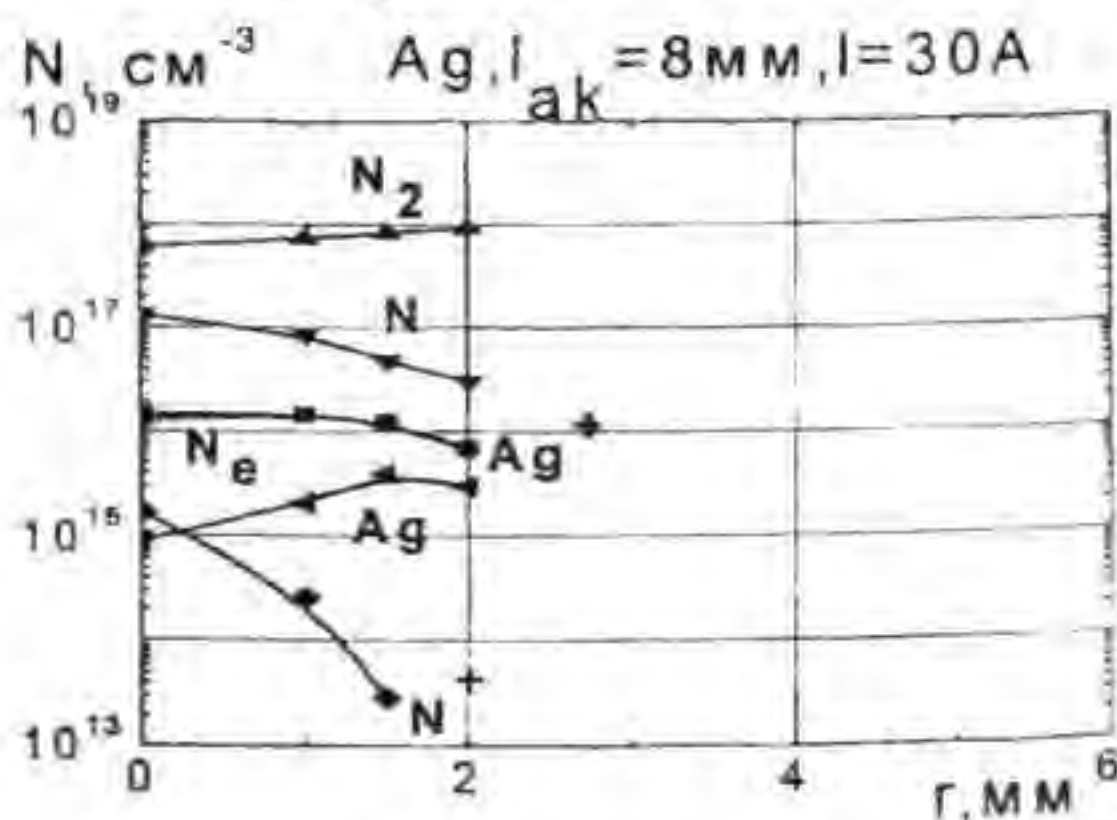


Рис.2. Рівноважний склад плазми електричної дуги, що горить між срібними електродами

На основі експериментально одержаних профілів $T(r)$ і $N_e(r)$ у припущенні наявності в плазмі локальної термодинамічної рівноваги (ЛТР) виконані розрахунки рівноважних розподілів компонент плазмової суміші Ag- N_2 (рис.2). Зазначимо, що рівноважний вміст срібла в розряді складає всього декілька відсотків. Ступінь іонізації срібла досягає 100%.

На наступному етапі в якості електродних матеріалів застосовувались композиційні склади Ag-Ni (90/10) і Ag-Ni (70/30). Для визначення радіальних профілів температури $T(r)$ та електронної концентрації $N_e(r)$ використовувались ті ж лінії AgI. Результати вимірювань представлені на рис. 3 і 4.

На основі експериментально одержаних температурних профілів та радіальних профілів інтенсивностей спектральних ліній срібла та нікелю, в припущенні рівноважного заселення енергетичних рівнів, обчислювалось

відношення концентрацій атомів срібла та нікелю N_{Ag}/N_{Ni} у плазмі [3] (Рис. 5). Як видно з рисунка, на осі розряду вміст срібла перевищує вміст нікелю в усіх режимах електричної дуги, що вивчалися.

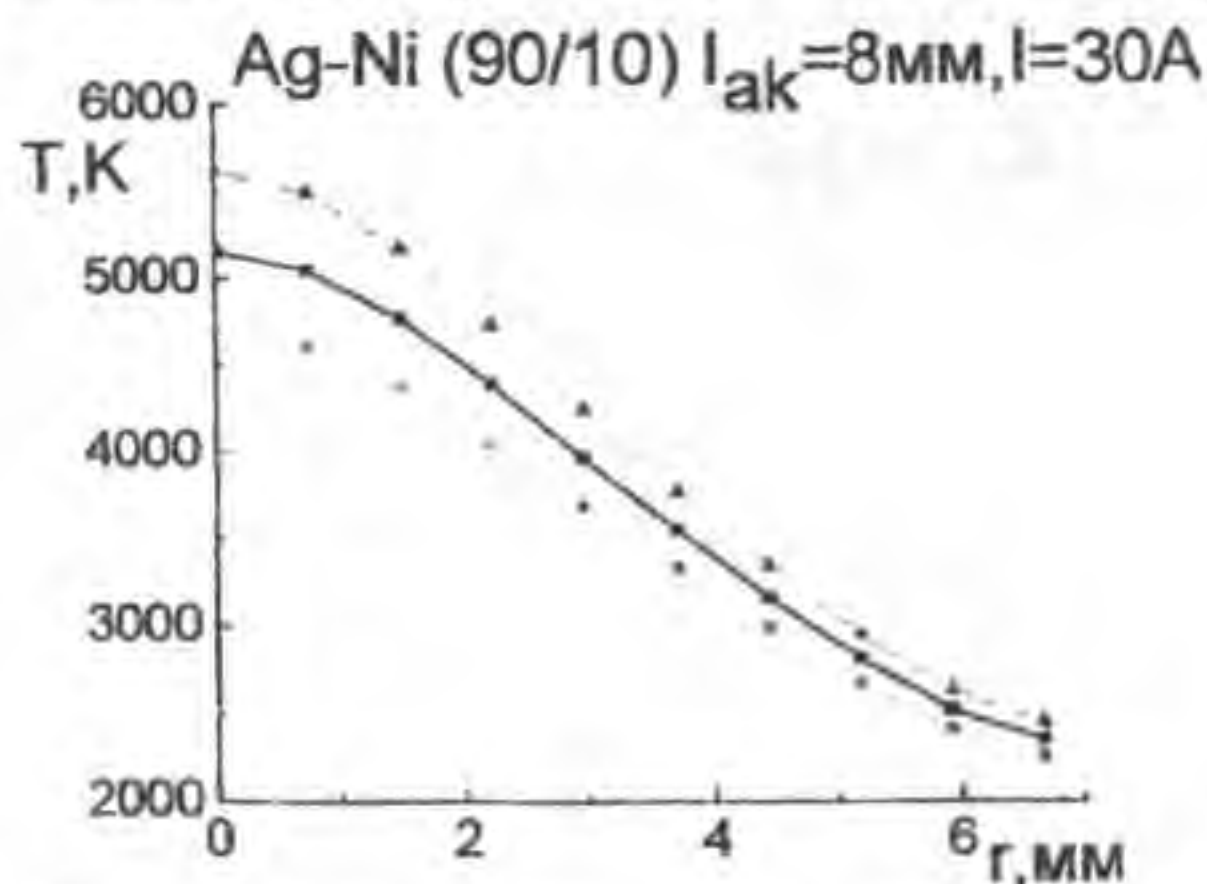


Рис.3. Радіальний профіль температури $T(r)$ плазми електричної дуги, що горить між Ag-Ni електродами

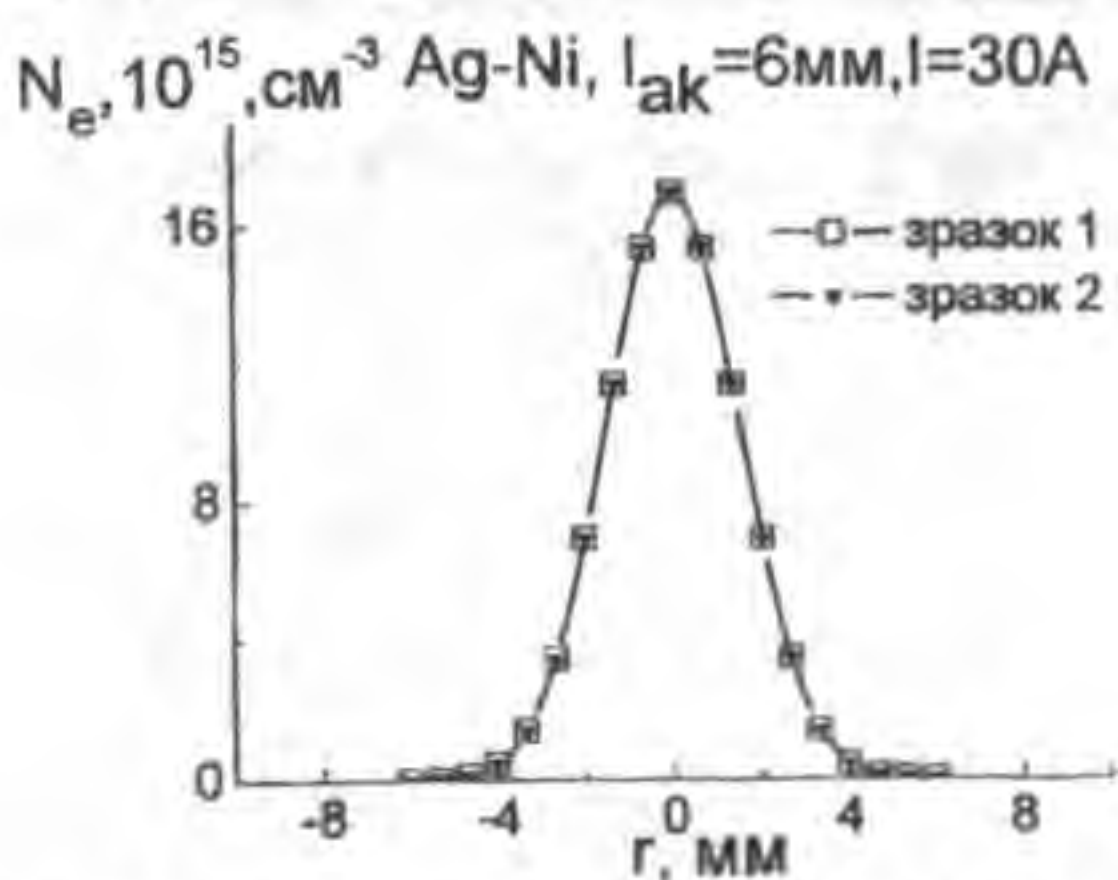


Рис.4. Радіальні профілі $N_e(r)$ плазми електричної дуги, що горить між Ag-Ni (90/10) електродами

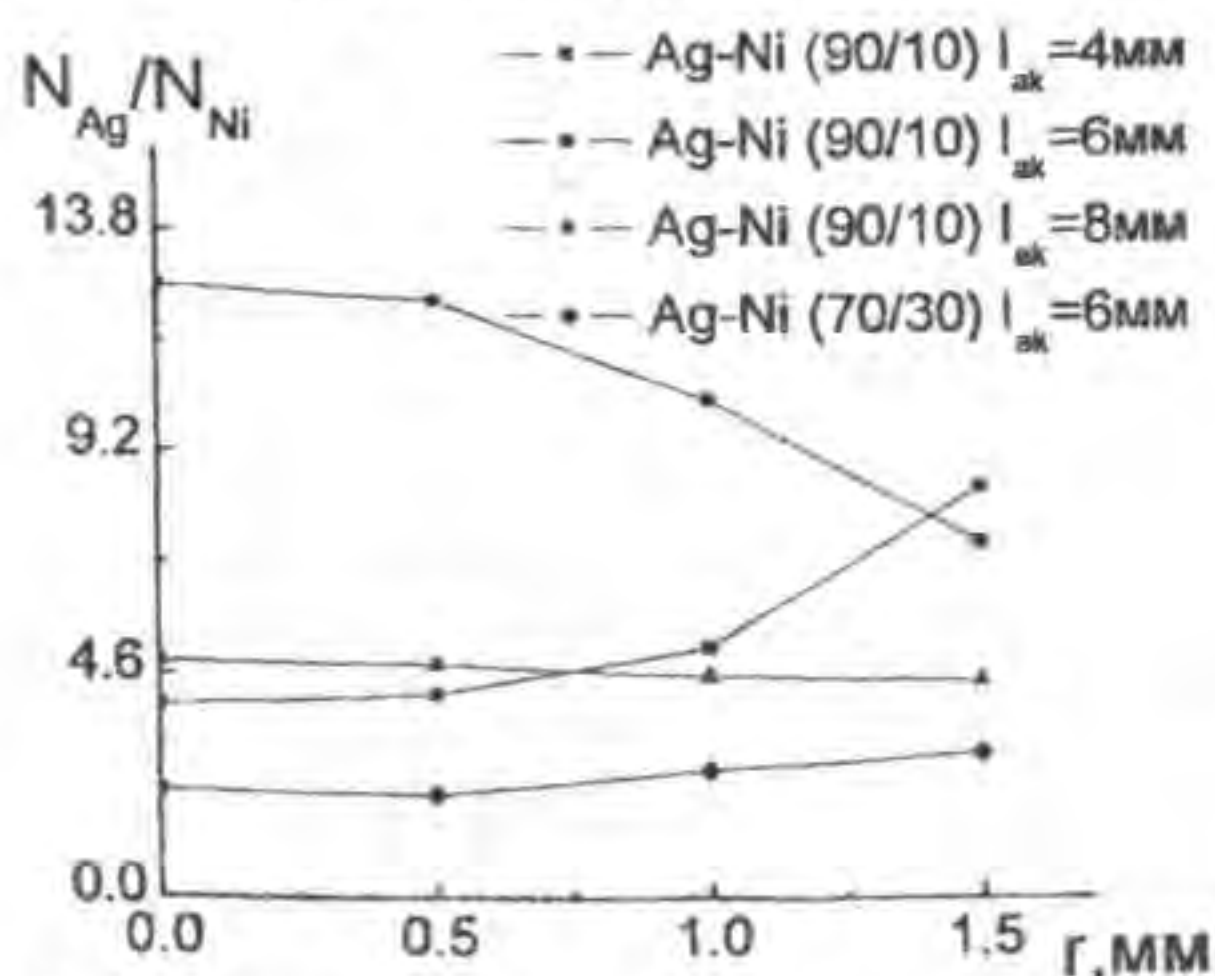


Рис.5. Радіальні профілі відношення концентрацій атомів срібла і нікелю у плазмі електродугового розряду між Ag-Ni електродами

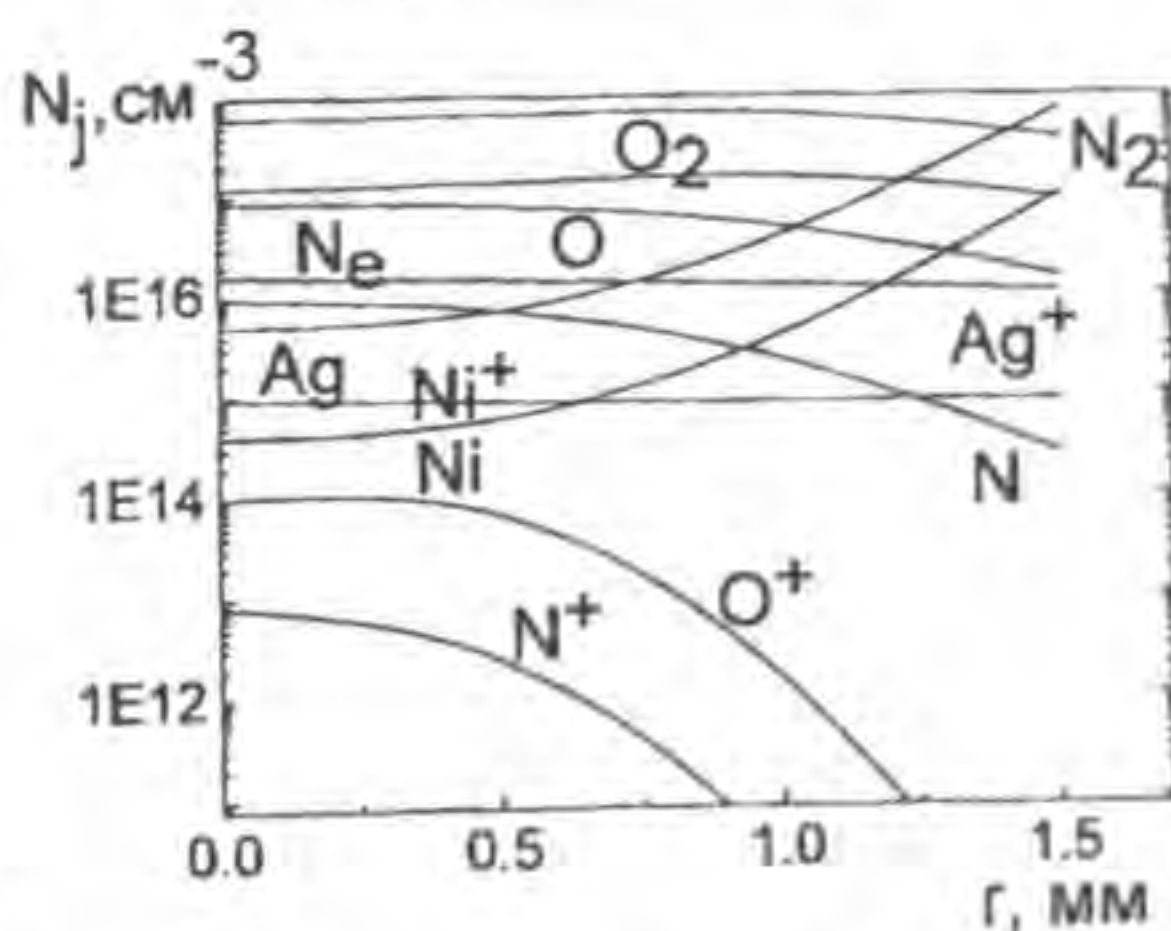


Рис.6. Рівноважний склад плазми електричної дуги, що горить у повітрі між Ag-Ni електродами

На основі експериментально одержаних профілів $T(r)$, $N_e(r)$ і N_{Ag}/N_{Ni} у припущенні наявності ЛТР виконані розрахунки [4] рівноважних розподілів компонент плазмової суміші Ag-Ni- повітря (рис.6).

Виходячи з цих розрахунків, можна визначити вміст срібла X_{Ag} та нікелю X_{Ni} в міжелектродному проміжку ($X_{Ag} = (N_{Ag} + N_{Ag+})/N_{total}$ та $X_{Ni} = (N_{Ni} + N_{Ni+})/N_{total}$, де N_{total} – загальна кількість усіх частинок в плазмі) (рис.7).

Треба зауважити, що зміст срібла у міжелектродному проміжку на порядок і більше перевищує вміст нікелю. Оскільки тиск насиченої пари над поверхнею срібла на порядок більший, ніж тиск пари нікелю (рис.8), то перевищення концентрації атомів срібла на осі розряду є природним.

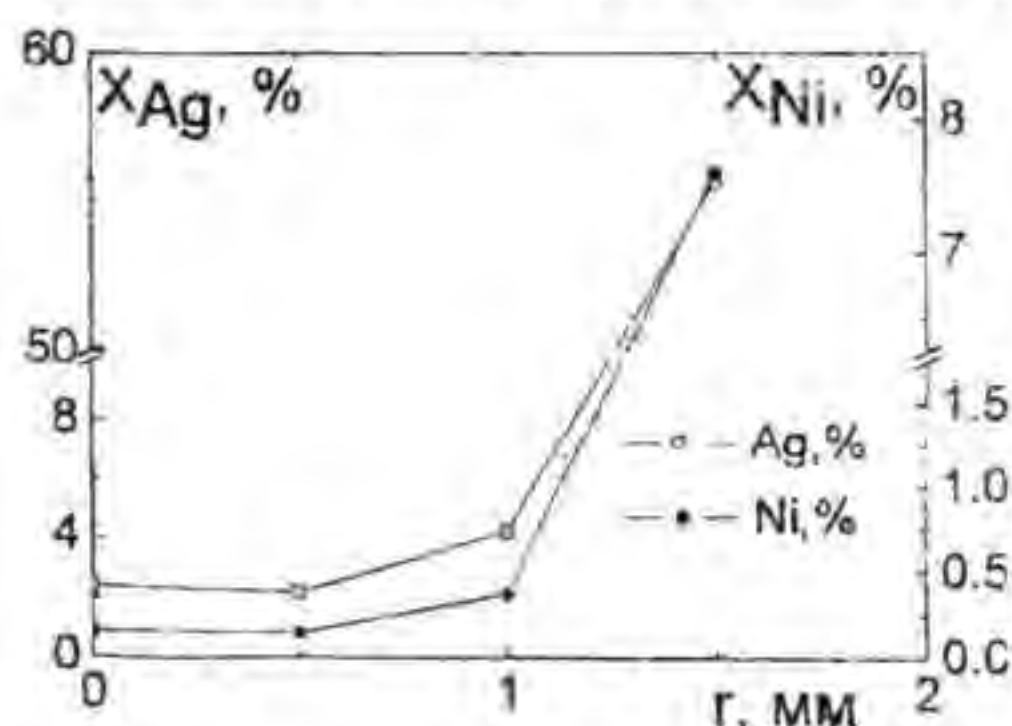


Рис.7. Радіальний розподіл X_{Ag} і X_{Ni} у середньому перерізі міжелектродного проміжку розряду між Ag-Ni електродами

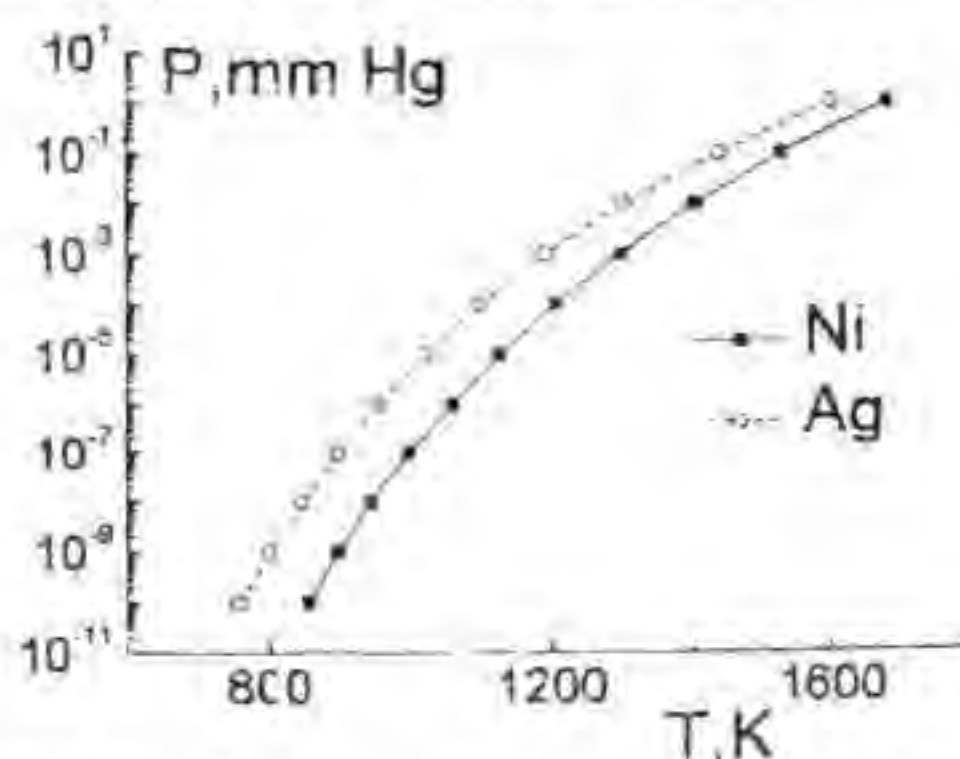


Рис.8. Тиск насиченої пари над поверхнею нікелю і срібла

Збільшення вмісту пари металу на периферії розряду можна пояснити розділенням багатокомпонентного складу плазми за рахунок амбіполярної дифузії (demixing) [5,6] та відхиленням стану плазми від ЛТР.

Внаслідок дії дугового розряду на поверхні електродів виникають структурні зміни [7]. Ці зміни робочого шару досліджувались за допомогою растрової мікроскопії.

Мікроструктурні дослідження показали більш активне випаровування срібла у порівнянні з нікелем, що призводить до значної інжекції срібла (наприклад, рис.9а). Початковий розмір частинок нікелю складав приблизно 1 мкм. Нагрівання цих частинок за рахунок погіршення теплопроводу при випаровуванні срібла зумовлює їх спікання у крупні конгломерати (наприклад, рис.9 б). Оскільки вони виступають над оточуючою поверхнею, то до цих конгломератів повинна прив'язуватись розряд. Однак, незначна спостережувана частка таких конгломератів свідчить про низький рівень їх участі у ерозійному руйнуванні поверхні електрода.

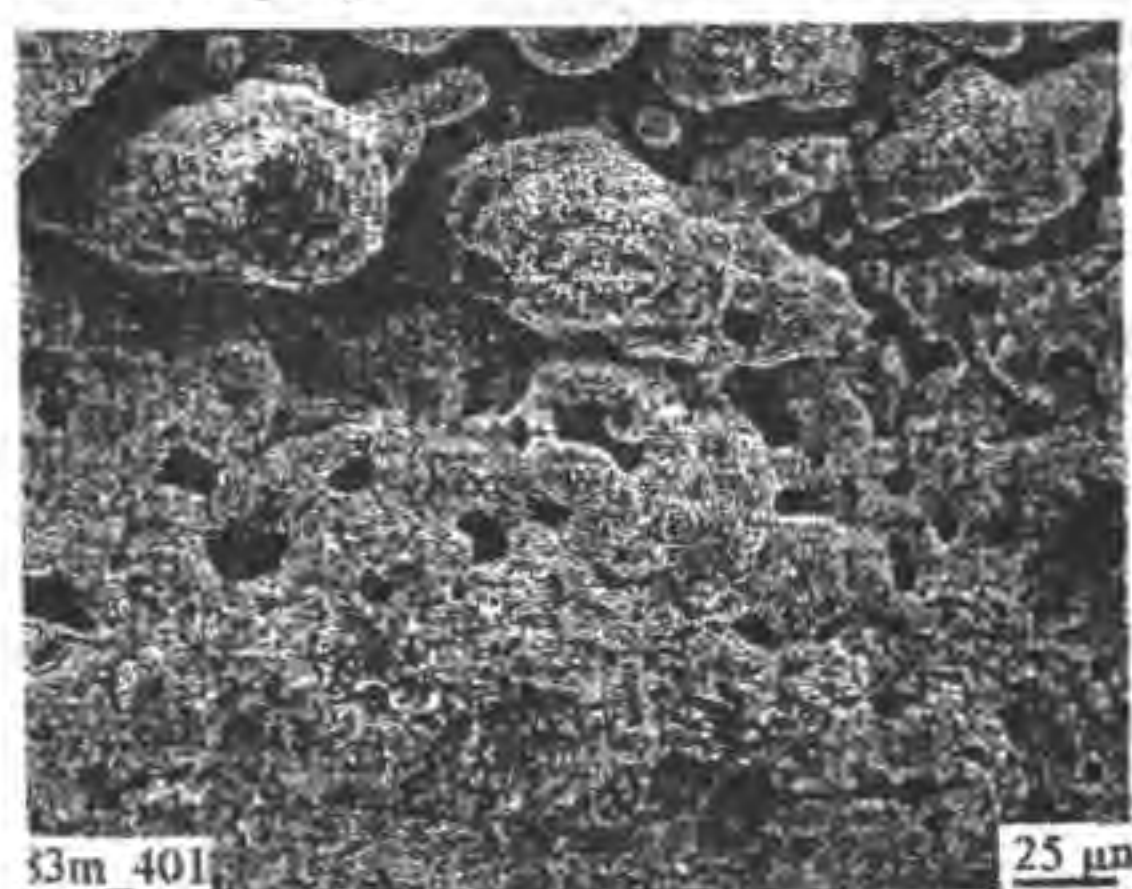
Висновки

Методами оптичної спектроскопії одержані радіальні профілі температури і електронної концентрації в плазмі розряду електричної дуги між срібними електродами.

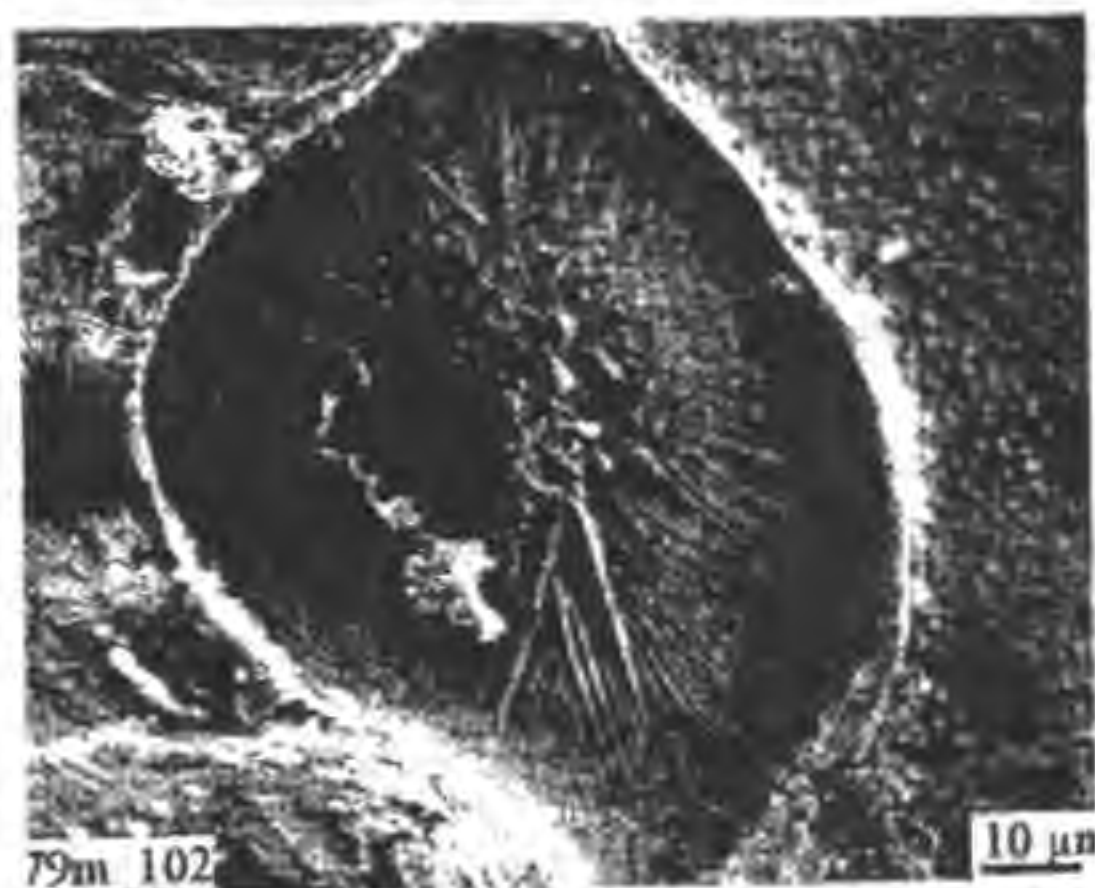
На основі цих даних розраховані рівноважні розподіли компонент плазмової суміші Ag-N₂. Вміст срібла в плазмі складає декілька відсотків, а ступінь іонізації срібла досягає 100%.

Тими ж спектроскопічними методами проведена діагностика плазми

дугового розряду між композиційними електродами Ag-Ni. Одержані результати дозволяють з'ясувати природу ерозії електродних матеріалів в дузі. Результати спектроскопічної діагностики не протирічать результатам металографічних досліджень.



а



б

Рис. 9. Мікроструктура робочого шару аноду Ag-Ni (90/10) – а, катоду Ag-Ni (70/30) – б

Література

1. Veklich A.N., Osidach V.Ye. Spectroscopy of electric discharge plasma in metal vapours // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Plasma Physics (11).-2005.-№2.-P.229-231.
2. Dimitrijevic M. S., Sahal-Brechot S. Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 2002 (submitted).
3. Babich I.L., Veklich A.N., Kryachko L.A., Minakova R.V., Osidach V.Ye. Thermal Plasma of a Free Burning Electric Arc between Consumable Electrodes // Switching Arc Phenomena. 10th Inter. Conf. SAP. Lodz. 19-22 Sep.-2005.-P.150-154.
4. Babich I.L., Veklich A.N., Osidach V.Ye. Spectroscopy of electric discharge plasma in metal vapours // Intern. Conf. "Electronics and Applied Physics" 24-27 November 2005, Kyiv, Ukraine. Proceedings. P. 167-169.
5. Грановский В.Л. Электрический ток в газе.- М.-Л.- 1952.- Ч.1, 432с.
6. Andanson P., Cheminat B. Contamination d'un plasma d'argon par des vapours anodiques de cuivre //Rev. Phys. Appl.-1979.-V. 14, N 8.-P. 775-782.
7. Минакова Р.В., Кресанова А.П., Крячко Л.А., Хоменко Е.В. Структурно-эрозионные явления на композиционных контактах на воздухе, в масле и вакууме // Электрические контакты и электроды. Киев: ИПМ НАНУ.- 2001.- С.103-122.

Надійшла до редакції 25.12.2005

УДК 621.382

Василь В.Ільченко¹, Марина В.
Квасниця², Олександр І.Кравченко,
Володимир Г.Майданник,
Олексій А.Макаренков

Аналіз продуктів дихання як новий підхід до моніторингу стану хворих на ниркову недостатність

Розглянуто можливості застосування мас-спектрометрії і напівпровідникової газової сенсорної системи для аналізу продуктів дихання хворих на ниркову недостатність. Показано, що мас-спектрометричний аналіз з подальшою статистичною обробкою мас-спектрів робить можливою класифікацію зразків продуктів видиху на групи хворих до процедури діалізу, після процедури і групу здорових. Виявлено відмінність відгуків сенсорної системи на зразки продуктів дихання хворих до і після процедури діалізу.

Ключові слова: мас-спектрометрія, напівпровідниковий сенсор, продукти дихання.

¹ E-mail: vai@univ.kiev.ua

² E-mail: anram@univ.kiev.ua

Vasyl' V. Il'chenko¹, Maryna
V. Kvasnytsia², Oleksandr I.
Kravchenko, Volodymyr
G.Majdannik,
Oleksij A.Makarenkov

The analysis of exhaled breath as a new approach for renal failure patients state monitoring

Our study shows the possibility to use mass spectrometry with further statistical management of mass spectrum for testing of renal failure.

Sensor system was used for the analysis of exhaled air of patients with renal failure. It was shown that sensor responses to the breath of patients before procedure of dialysis and after are different while the general tendency of the response change is observed.

Key Words: mass-spectrometry, semiconductor gas sensor, exhaled breath.

Дослідження останніх років показали, що у хворих паралельно зі змінами в біохімічному складі крові відбуваються якісні та кількісні зміни у повітрі, яке видихається [1,2]. Між складом цього повітря і біохімічним складом крові є певна доведена кореляція [3]. Таким чином, тестування продуктів дихання дозволяє запропонувати новий підхід до діагностики ряду патологічних станів: раку легенів, серцевої патології, запальних процесів, інтоксикацій [2,4,5], в тому числі інтоксикацій, які спричинені ендогенними метаболітами при хронічній нирковій недостатності.

Процедура гемодіалізу, що використовується в якості замісної ниркової терапії, є потужним фактором, що спричиняє суттєвий вплив на гомеостатичні функції організму. Отже переносність процедури гемодіалізу значно впливає на якість і тривалість життя хворих, що в свою чергу диктує необхідність постійного моніторингу ключових параметрів стану пацієнта. В теперішній час в клінічній практиці з цією метою поширено використання маркерів біохімічного складу крові, специфічних для хронічної ниркової недостатності (сечовина, креатинін, калій та ін.). Проте, подібна методика, будучи інвазивною, пов'язана з додатковими крововтратами, а також є недостатньо оперативною, що не дозволяє оцінити статус параметрів організму безпосередньо під час процедури.

Вважається, що такий підхід до спостереження стану пацієнта є занадто спрощеним і не враховує зміни інших параметрів під час процедури, що може призвести до перебільшення або навпаки надто малої дози діалізу. Для визначення адекватного часу проведення процедури (доза діалізу) необхідна система моніторингу стану очищення крові. В якості таких систем дослідниками запропоновано системи типу електронний ніс [1].

Враховуючи безпечність та неінвазивність цього методу, може бути доцільним його використання для моніторингу змін, що відбуваються в організмі пацієнтів, під час процедури гемодіалізу. З метою виявлення цих змін були проведені мас-спектрометричні дослідження продуктів дихання з подальшим їх статистичним аналізом [6]. Дослідження проводилися на базі кафедри педіатрії №4 Національного медичного університету у відділенні гемодіалізу №6. Взяття проб здійснювалось у хворих до та після процедури діалізу; для контролю використовували групу умовно здорових людей. Аналіз проводився на магнітному мас-спектрометрі MI-1201.

Основною відмінністю мас-спектрів продуктів видиху хворих на ниркову недостатність є поява нових компонент мас-спектру, зокрема у діапазоні m/z від 38 до 60. Нові компоненти, присутні у мас-спектрі продуктів видиху хворого, можна інтерпретувати як появу в результаті порушення метаболізму у видиху певних речовин.

У великому наборі спектральних даних продуктів дихання, що демонструє різноманітні ефекти, такі як нормальну фізіологічну варіацію поміж пацієнтами, не просто ідентифікувати значущі зміни.

Для класифікації мас-спектрів без ідентифікації складових можна застосувати статистичну обробку спектральних даних.

Порівнюючи мас-спектри, отримані при аналізі видиху хворих і контрольної групи, можна визначити відмінності, як то появу у спектрах видиху хворих нових компонент, зникнення певних компонент чи зміну відносної концентрації певних компонент. Таким чином є можливість побудувати маркерні вектори, що складатимуться з відносних концентрацій сигнальних компонент.

Кожен спектр являє собою набір піків певних інтенсивностей відповідних m/z величин. Нехай у всіх спектрах набору присутні g величин m/z , що відповідають молекулярним іонам або іонним фрагментам. Отже кожен мас-спектр являє собою точку у спектральному просторі, тобто

$(v_1, \dots, v_r)$, де v_i – відносні інтенсивності i -того піку, що є функціями присутніх у зразку молекул. Отже, можна допустити, що точки, які відповідають спектрам здорової групи, групуватимуться в один кластер, а ті, що є спектрами видиху хворих, – в інший окремий кластер. Можливе також перекривання кластерів за осями, що відповідають певним незмінним компонентам видиху, на утворення яких дане захворювання не має впливу. За цими кластерами у спектральному просторі і можна визначити маркерний вектор сигнальних компонент. Гіпотеза класифікації полягає у тому, що параметри спектру видиху здорової людини лежать ближче до відповідного кластера. При подальшій діагностиці кожний новий спектр аналізуватиметься за відстанню до центру кожного з кластерів. Проблемою є багатовимірність спектрального простору, а отже неможливість прямого графічного аналізу. Для забезпечення аналізу застосовують статистичні методи обробки багатовимірних даних, такі як аналіз головних компонент, при якому дані проєктуються на осі, що відповідають найбільшій дисперсії. Аналіз головних компонент являє собою перетворення спектрального простору у простір меншої вимірності з малою або взагалі без втрати інформативності.

Аналіз головних компонент – потужний інструмент для графічного представлення даних і початкової класифікації об'єктів з детектуванням взаємодій між великою кількістю змінних і параметрів. Головні компоненти – ортогональні лінійні комбінації початкових змінних. Перетворення вибирається таким чином, що перші головні компоненти виділяють максимальну дисперсію експериментальних даних [7].

Метою аналізу було виділити напрями проєктування, що утворені головним чином найбільш дискримінуючими компонентами, тобто тими, що й вносять основний вклад у відмінність мас-спектрів продуктів видиху хворих і контрольної групи.

Кожен мас-спектр представлено як:

$$x_i = \begin{pmatrix} v_{i1} \\ v_{i2} \\ \vdots \\ v_{ir} \end{pmatrix}, \quad i=1..n, j=1..r \quad (1)$$

де r – кількість виділених у мас-спектрі значень m/z , що відповідають молекулярним іонам або іонним фрагментам, n – кількість мас-спектрів у наборі, v_{ij} – відносна інтенсивність j -того піку для i -того мас-спектру.

Матриця X відповідає набору даних для усієї сукупності мас-спектрів видихів хворих до і після процедури діалізу:

$$X = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{21} & \dots & v_{n1} \\ v_{12} & v_{22} & \dots & v_{n2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{1r} & v_{2r} & \dots & v_{nr} \end{pmatrix} \quad (2)$$

Загальне середнє підраховується і віднімається від елементів кожного зразка, утворюючи набори зразків з нульовим середнім X' :

$$\mu = 1/n \sum x \quad (3)$$

$$\mu = \frac{1}{n} \begin{pmatrix} v_{11} + v_{21} + \dots + v_{n1} \\ v_{12} + v_{22} + \dots + v_{n2} \\ \dots \\ v_{1r} + v_{2r} + \dots + v_{nr} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \dots \\ \mu_r \end{pmatrix} \quad (4)$$

Стовпчики матриці X' складаються з усіх зразків з нульовим середнім:

$$X' = \begin{pmatrix} v_{11} - \mu_1 & v_{21} - \mu_1 & \dots & v_{n1} - \mu_1 \\ v_{12} - \mu_2 & v_{22} - \mu_2 & \dots & v_{n2} - \mu_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{1r} - \mu_r & v_{2r} - \mu_r & \dots & v_{nr} - \mu_r \end{pmatrix} \quad (5)$$

Матриця коваріації, що являє собою багатовимірний аналог дисперсії, може бути підрахована як:

$$C = X' X'^T \quad (6)$$

Головні вектори – це власні вектори, y_i , матриці коваріації C . Існує найбільше $w = \min(n, r)$ ненульових власних значень λ_j ($j = 1, \dots, w$) з відповідними власними векторами y_j :

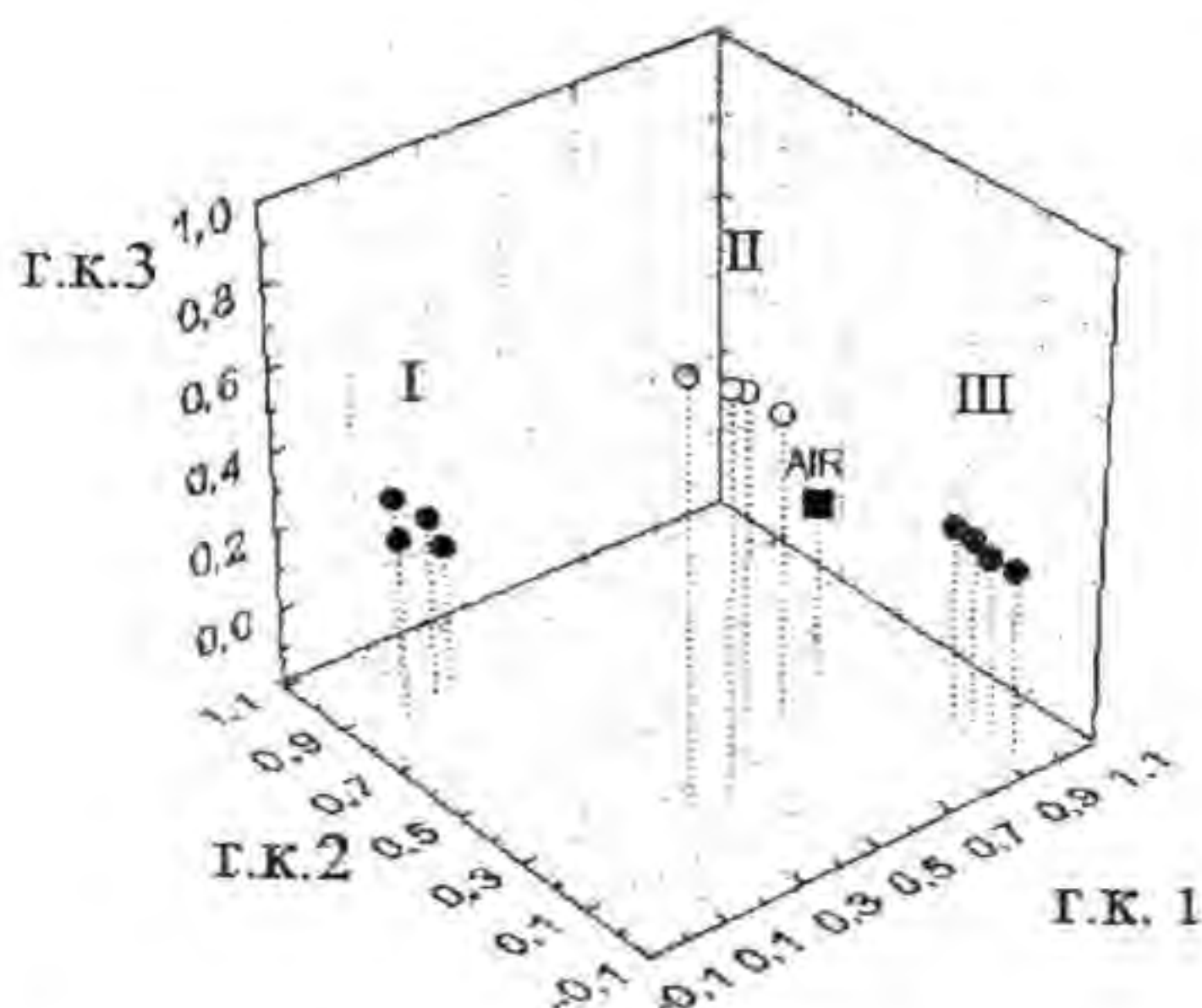
$$C y_j = \lambda_j y_j \quad (7)$$

Кожне власне значення λ_j пропорційне дисперсії оригінальних даних в напрямку j -тої головної компоненти. Зменшення вимірності у аналізі головних компонент здійснюється сортуванням компонентів за власними векторами, відкидаючи власні вектори з найменшими відповідними власними значеннями.

Після відкидання цих векторів w' власних векторів, що залишилися, складають базис. Коли набір головних компонент вибрано за базис, точки зразку проектується на ці осі

$$x_p = Yx' \quad (x' \in X'), \quad (8)$$

де ряди матриці Y – власні вектори y_j ($j=1, \dots, w'$), і x_p – проекції здорових зразків на головні компоненти утвореного простору. Отримані результати наведені на діаграмах Мал.1. Для більшої наочності отриманих результатів було утворено проекції тривимірного простору головних компонент у двовимірні простори усіх комбінацій його осей, це дозволяє обрати найбільш зручну для аналізу і з точки зору розділення кластерів проекцію.



Мал.1. Аналіз головних компонент ілюструє розділення даних, відповідних мас-спектрам у тривимірному просторі. Осі г.к.1, г.к.2, г.к.3 відповідають першій, другій та третій головним компонентам. Точки, позначені на Мал. 3. I, відповідають мас-спектрам газів, що є продуктами видиху хворих на ниркову недостатність до процедури діалізу, II – після процедури діалізу, III – контрольній групі. Air відповідає мас-спектру повітря, в атмосфері якого знаходилися пацієнти під час збору зразків видихів.

Діаграма ілюструє розбиття на класи у просторі головних компонент точок, що відповідають видихам хворих, які ще не пройшли процедури гемодіалізу, і контрольної групи, малу варіацію даних всередині групи, що відповідає здоровим. Також спостерігається близьке розташування точок,

які відповідають видихам хворих після процедури діалізу, до точок контрольної групи.

Як видно з Мал.1, точки, відповідні мас-спектрам видихів хворих після процедури гемодіалізу, знаходяться значно ближче до спектрів контрольної групи, ніж ті, які відповідають спектрам видихів хворим до початку діалізу. Це свідчить про кореляцію між складом повітря, що видихається, та складом крові. На отриманих діаграмах спостерігається відокремлення точок, які відповідають постдіалізним аналізам від тих, що відповідають аналізам до початку процедури. Ці точки лежать значно ближче до точок контрольної групи. Наведені результати вказують на ефективність аналізу. Застосований метод статистичної обробки результатів, що ґрунтується на аналізі головних компонент, дозволив проаналізувати різницю в мас-спектрах продуктів видиху хворих на ниркову недостатність та умовно здорових людей навіть без ідентифікації присутніх у видиху сполук.

Перспективним є застосування для аналізу продуктів видиху сенсорних систем [8].

Нами запропоновано використання напівпровідникового сенсора, який описаний в [9,10]. Можливість проведення моніторингу стану пацієнта до і після процедури гемодіалізу перевірялась у наступних дослідженнях.

Продукти дихання хворих на ниркову недостатність, зібрані до і після процедури діалізу, аналізувалися сенсорною системою, яка описана в [9,10]. Дослідження показали, що отримані відгуки на видихи хворих до і після процедури відрізняються.

З метою виявлення і підкреслення різниці між відгуками видихів з урахуванням багатьох параметрів була проведена статистична обробка за методом аналізу головних компонент, причому кожний сенсорний відгук було представлено як вектор-стовпець, елементи якого відповідали зміщенням напруги для певних значень другої похідної.

Можна спостерігати, що наявність захворювання призводить до однакової для усіх пацієнтів зміни складу дихання, яка відображається у зсуві кривої відгуку сенсора, що був використаний. Середній зсув вздовж осі напруг максимумів кривих, що відповідають відгукам на продукти дихання до діалізу, відносно постдіалізних кривих становить 0,28В.

Таким чином, в результаті проведених досліджень, спостерігається закономірна варіація результатів між різними хворими із збереженням загальної тенденції зсуву максимуму постдіалізного відгуку відносно додіалізного на сталу величину, що можна використати для контролю за станом пацієнта під час процедури діалізу.

Згідно з літературними даними при нирковій недостатності видих хворих характеризується вмістом диметиламіну $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$ і триметиламіну $(\text{CH}_3)_3\text{N}$, мас-спектри яких, отримані методом іонізації електронним

ударом з енергією електронів 70eV[1], якісно узгоджуються з отриманими нами результатами. Одними із сполук, що можуть бути відповідальними за різницю відгуків сенсора, називають метилмеркаптан, ацетон, 2-бутанон, толуен, піридин, 4-гептанон та інші [1]. Ці сполуки характеризуються малою молекулярною масою (<500) і легко можуть бути видалені з крові під час процедури діалізу, що призводить до їх зниженої концентрації у пацієнтів після діалізу. З іншої сторони, було встановлено, що під час процедури діалізу відбувається пероксидація ліпідів, що спричиняє появу альдегідів, кетонів і карбогідратів (етан, пентан) [1]. Отже, з вищенаведеного можна зробити висновок, що сенсорний відгук формується комбінованим ефектом а) утворенням летких сполук під час процедури діалізу шляхом пероксидації ліпідів; б) очищенням крові від відпрацьованих сполук.

Як бачимо, велика кількість сполук, що може впливати на склад продуктів видиху значно ускладнює аналіз. Однак, в той же час, як видно з результатів мас-спектрометричних досліджень, можна провести однозначне розділення продуктів видиху пацієнтів до процедури діалізу і після неї без визначення окремих компонент. Окремо слід зазначити, що сенсор системи [9], що використовувалась в дослідженнях, являє собою прилад створений на основі кремнієвої мікроелектронної технології і працює при температурі роботи інтегральної схеми обробки сигналу. Таким чином, отримані за допомогою такої напівпровідникової сенсорної системи результати відкривають можливості для експресного тестування продуктів видиху хворих і можуть бути використані в хроно- та телемедицині.

Література

1. Reinhard Fend, Conrad Bessant, Anthony Williams, Anthony Woodman Monitoring haemodialysis using electronic nose and chemometrics, <http://hdl.handle.net/1826/807>
2. Michael Philips Method for the collection and Assay of Volatile Organic Compounds in breath// Analytical Biochemistry 1997, 247, p.p.272-278.
3. J.K. Nicholson, J. C. Lindon and E.Holmes Understanding the metabolic responses of living systems to pathophysiological stimuli via multivariate statistical analysis of biological NMR spectroscopic data, Xenobiotica, 29 (1999), p.p.1181-1189.
4. L.R. Narasimhan, W. Goodman, and C.Kumar N. Patel Correlation of breath ammonia with blood urea nitrogen and creatinine during hemodialysis www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas/071057598

5. David Smith et al. The selected ion flow tube method for workplace analyses of trace gases in air and breath: its scope, validation, and applications Appl.Occup.Environ.Hyg. 13(12) December 1998, 13(12), p.p.817-823.
6. M.V.Kvasnitsa, V.V. Ilchenko, A.I.Kravchenko Mass spectrometry of exhalation air as a new approach to testing of illness. Proceedings of the Fourth International Young Scientists Conference on Applied Physics. Ukraine, Kyiv, 2004, p.p.173-175.
7. Ryan H.Lilien, Hany Farid, Bruce R.Donald Probabilistic Disease classification of expression-dependent proteomic data from mass spectrometry of human serum // Journal of Computational Biology, 2003, Vol. 10, No. 6: p.p.925-946.
8. Yu Hao, Xu Liang, Zhang Deng Detection volatile organic compounds in breath as markers of lung cancer using a novel electronic nose. Book of abstracts Second IEEE International Conference on Sensors, 2003, p.p.476-477
9. Ільченко В.В., Кравченко О.І., Грінченко В.Т. Патент України. №64151 Пріоритет від 17.02.2003 р. Бюлетень №2, 16.02.2004.
10. Il'chenko V.V., Kravchenko A.I., Telega V.M., Chahun V.P., Gaskov A.M., Grinchenko V.T. Frequency dependence of the second derivative of the current-voltage characteristic of the heterostructure SnO₂-Si at the gas adsorption. Book of abstracts Second IEEE International Conference Sensors. Toronto, Canada, Oct 22-24, 2003, p.p.567-568.

Надійшла до редакції 20.01.2006

УДК 621.386.834; 622.383

Володимир В. Ільченко¹, Оксана
Ю. Кондратович, Олег В. Третяк,
Микола В. Шкіль

**Дослідження впливу
розподілених шарів квантових
точок на частотну залежність
ємності контакту метал-
напівпровідник**

Проведено моделювання частотної залежності вольт-фарадної характеристики для контакту метал-напівпровідник з шарами квантових точок розподілених в об'ємі напівпровідника. В роботі отримано аналітичні вирази вольт-фарадних залежностей для перехідних частот.

Показано, що, користуючись цими співвідношеннями, можна на основі експериментально отриманих вольт-фарадних залежностей визначати такі фізичні параметри квантових точок як їх концентрація та енергетичне положення.

Ключові слова: квантова точка, глибокий рівень, вольт-фарадна характеристика.

¹ E-mail: ilch@uninet.kiev.ua

Дослідження вольт-фарадних характеристик діодів Шоткі з шарами самоорганізованих квантових точок в останні роки привертають до себе все більшу увагу науковців та технологів у зв'язку з можливими перспективами створення функціонально нових приладів мікроелектроніки [1-8]. За допомогою вимірювання вольт-фарадних характеристик таких структур в роботах [9-11] робилася спроба визначення параметрів енергетичного спектру квантових точок. В той же час в цих роботах в якості відправних співвідношень для розрахунку таких фізичних параметрів, як концентрація глибоких рівнів квантових точок та їх енергетичне положення, використовувалися традиційні формули [12-14], що були отримані раніше для ідеалізованих моделей контакту метал-напівпровідник з глибокими рівнями домішок, де ємність розраховувалася у припущенні гранично високих частот тестового сигналу, коли глибокі

Volodymir V. Ilchenko¹, Oksana Y. Kondratovich, Oleg V. Tretyak, Mikola V. Shkil

**The investigation of the influence
of the distributed quantum dots
layers on frequency dependence of
the capacitance of metal-
semiconductor contact**

Modeling of quantum dots layers levels influence on voltage-capacitance characteristic has been carried out. Precise equations for voltage-capacitance dependence of metal-semiconductor structure taking into consideration the presence of quantum dots levels in it have been obtained.

Theoretical data for cases of low and high frequencies have been compared with experimental data. Equations for voltage-capacitance dependence calculation can be used for determination of quantum dots parameters.

Key words: quantum dot, deep level, voltage-capacitance characteristic.

рівні не встигають змінювати свого зарядового стану під час проведення вимірювань. Такі припущення є справедливими, якщо енергетичні рівні є достатньо глибокими, так що час їх релаксації значно перевищує характерні часи зміни тестового сигналу. Проте у випадку, коли енергетичні рівні зумовлені присутністю квантових точок, положення яких суттєво залежить від розмірів квантової точки, критерії щодо співвідношень між характерними часами їх перезавантаження та характерними часами зміни тестового сигналу можуть не виконуватися. В цьому випадку енергетичне положення цих рівнів квантових точок перестав відповідати поняттю класичного глибокого рівня, а в теоретичних співвідношеннях для ємності необхідно враховувати відповідні доданки, що відповідають за перезавантаження цих енергетичних рівнів.

Метою даної роботи було розрахувати вольт-фарадну залежність напівпровідникової структури з урахуванням наявності в ній рівнів квантових точок, рівномірно розподілених вздовж структури, для випадку перехідних частот вимірювання ємності.

Для визначеності в статті розглядається модель контакту метал-напівпровідник р-типу з рівнями мілкої легуючої домішки та розподіленими в об'ємі напівпровідника шарами квантових точок, що доволі часто реалізується в структурах з Ge квантовими точками в Si.

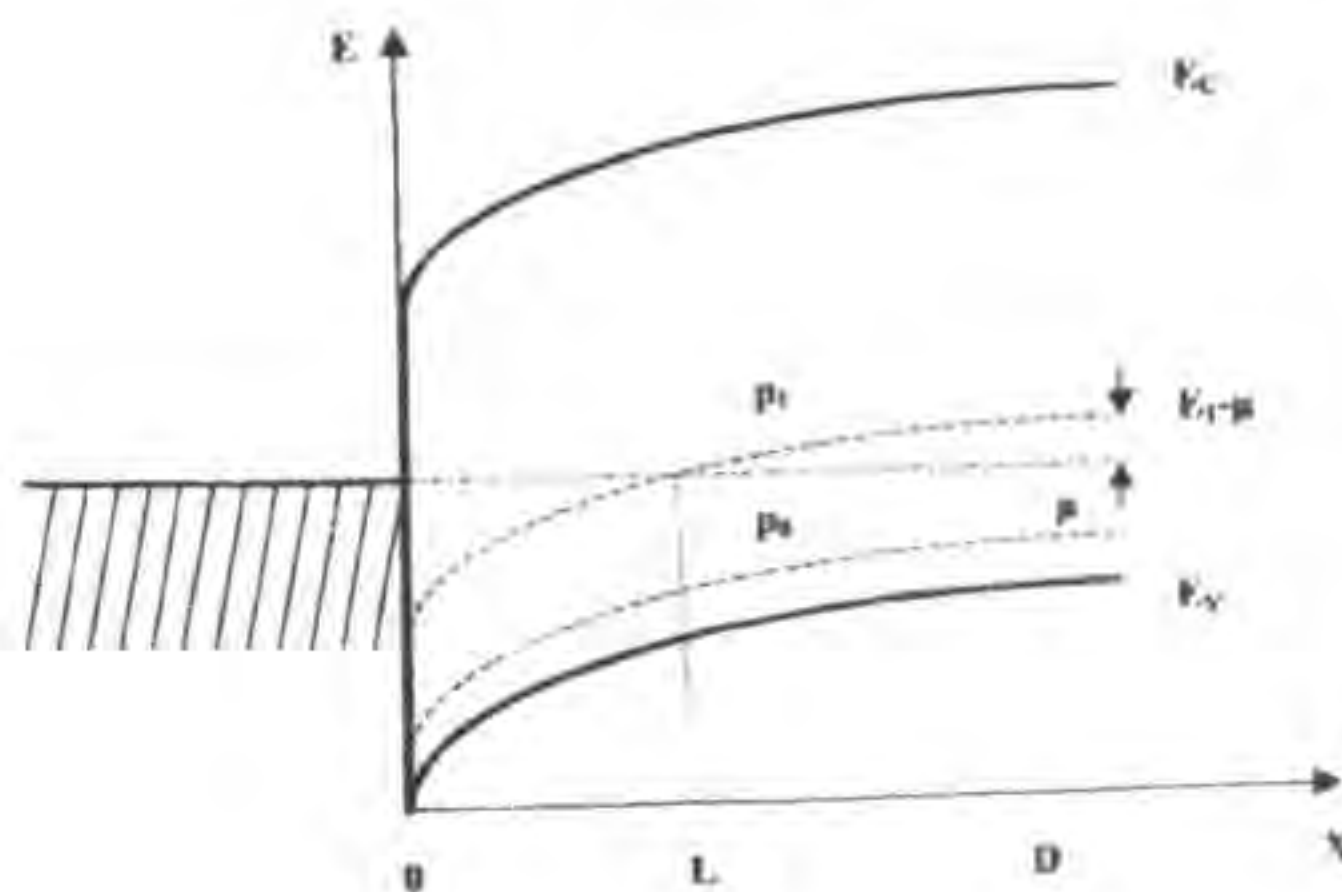


Рис. 1. Зонна діаграма контакту метал – напівпровідник при наявності двох енергетичних рівнів: мілкої легуючої домішки та рівнів розподілених в об'ємі шарів квантових точок.

В наступних розрахунках будемо виходити з наближення, що поверхневих станів в нашому контакті немає та порушенням функції розподілу за рахунок струму в даній структурі можна знехтувати.

Нехай до структури метал-напівпровідник прикладено електричну напругу, що являє собою суму постійної складової U_0 та тестового сигналу змінної складової певної частоти ω (Рис. 2) з подвійною амплітудою ΔU_0

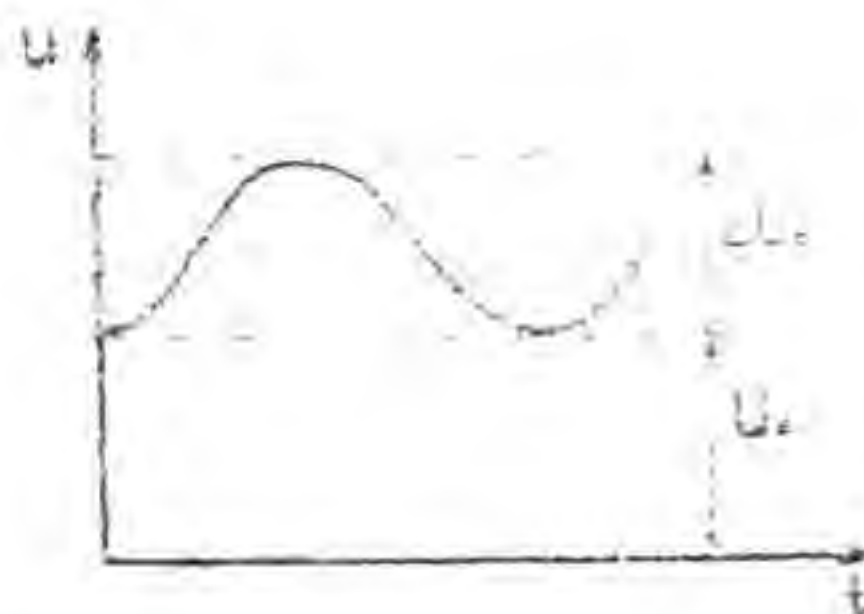


Рис. 2. Залежність прикладеної до контакту метал-напівпровідник напруги від часу.

Зрозуміло, що при достатньо низькій частоті тестового сигналу, коли рівні квантових точок будуть перезаряджатись за рахунок процесів захоплення та емісії носіїв, загальна товщина ОПЗ має змінюватись з такою ж самою частотою.

В даному розділі будемо розглядати такі частоти тестового сигналу ω , щоб $\frac{1}{\tau_r}$, де τ_r - час захоплення та емісії дірок, були одного порядку з ω . При цьому будемо вважати, що частота тестового сигналу ω задовольнятиме нерівність $\omega \ll \frac{1}{\tau_m}$, де τ_m - постійна часу Максвелла.

В досліджуваній структурі на таких частотах дірки будуть встигати як покидати ОПЗ так і повертатися туди знову. Але паралельно з цим буде

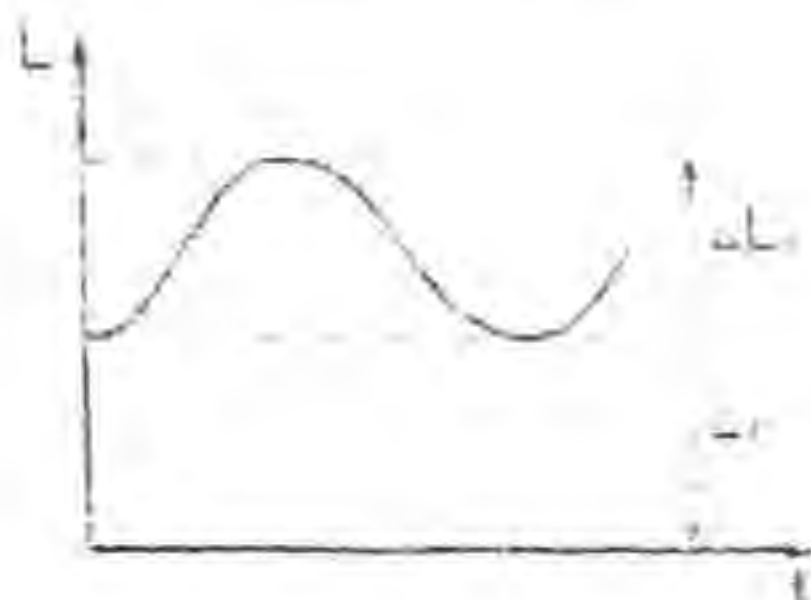


Рис. 3. Залежність товщини шару L від часу, де енергетичний рівень квантової точки перетинає рівень Фермі.

також певною мірою змінюватись і заповнення рівнів квантових точок. Оскільки на перехідних частотах повної релаксації носіїв на рівнях квантових точок не відбувається, концентрація дірок на глибоких рівнях буде змінною величиною в залежності від частоти змінної складової прикладеної напруги.

Розглянемо зміну заряду дірок на глибоких рівнях в залежності від часу. Як це впливає із Рис.2, на глибокі рівні що належатимуть шару L будуть захоплюватися електрони. Отже при прикладенні до структури змінної напруги товщина шару L теж має змінюватися як це показано на Рис.3.

В цьому випадку змінну складову товщини L можна записати у вигляді:

$$\Delta L(t) = \frac{\Delta L_0}{2} (1 - \cos(\omega t)), \quad (1)$$

де L_0 – постійна складова товщини цього шару, ΔL_0 – подвійна амплітуда змінної складової, а змінну частину сумарного заряду глибоких рівнів можна обчислити за формулою:

$$Q(t) = \int_{L_0}^{L_0 + \Delta L(t)} p(x, t) dx \quad (2)$$

Концентрація дірок на рівнях квантових точок в точці $L_0 \pm \Delta L_0$ в залежності від напівперіоду тестового сигналу буде змінюватися з часом по відповідним експонентам від деякого мінімального значення $p_{\min}(x)$ до максимального $p_{\max}(x)$ і в зворотньому напрямку в залежності від величини $\Delta L(t)$ в певний момент часу. Якщо $x < \Delta L(t)$, то відбувається процес емісії, якщо ж $x > \Delta L(t)$, то – процес захоплення дірок.

Таким чином для концентрації дірок на рівнях квантових точок можна записати

$$p(x, t) = \begin{cases} p - (p - p_{\min}(x)) e^{\frac{t - t_0(x)}{\tau}}, & t_0(x) < t < T - t_0(x) \\ p_{\max}(x) e^{\frac{t - T + t_0(x)}{\tau}}, & T - t_0(x) < t < T + t_0(x) \end{cases}, \quad (3)$$

де $t_0(x)$ – момент початку періодичного процесу перезавантаження, T – період коливань.

Величина $t_0(x)$ визначається з умови (див. Рис.3,4):

$$\frac{\Delta L_0}{2} (1 - \cos(\omega t_0(x))) = x. \text{ Таким чином}$$

$$t_0(x) = \frac{\arccos\left(1 - \frac{2x}{\Delta L_0}\right)}{\omega} \quad (4)$$

В момент часу $t_0(x)$ концентрація заряду дірок в точці x мінімальна, а в момент часу $T - t_0(x)$ максимальна. Отже, із (3) можна отримати:

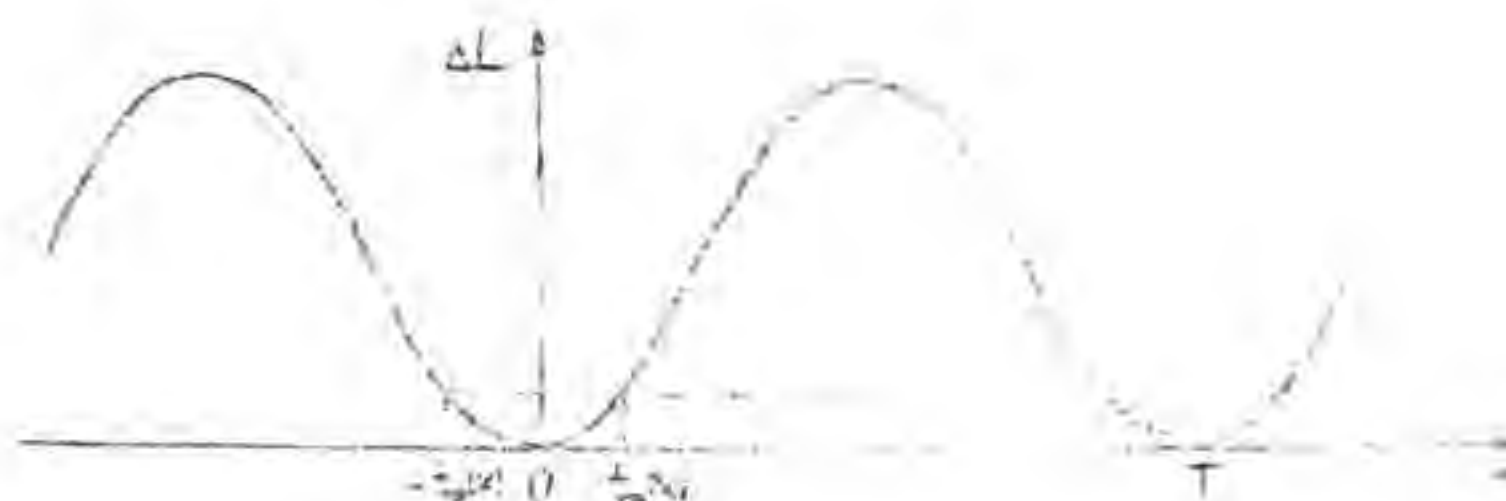


Рис. 4. Залежність змінної складової товщини шару, де всі рівні квантових точок встигли релаксувати.

$$p - p_{\min}(x) = (p - p_{\min}(x))e^{-\frac{T - 2t_0(x)}{\tau}} \quad (5)$$

Від моменту часу $T - t_0(x)$ до $T + t_0(x)$ концентрація заряду дірок спадає від $p_{\max}(x)$ до $p_{\min}(x)$:

$$p_{\min}(x) = p_{\max}(x)e^{-\frac{2t_0(x)}{\tau}} \quad (6)$$

Підставляючи (6) в (5), можна отримати:

$$p_{\max}(x) = p \frac{1 - e^{-\frac{T - 2t_0(x)}{\tau}}}{1 - e^{-\frac{2t_0(x)}{\tau}}} \quad (7)$$

Зафіксуємо певний момент часу t і обчислимо для нього $Q(t)$ за

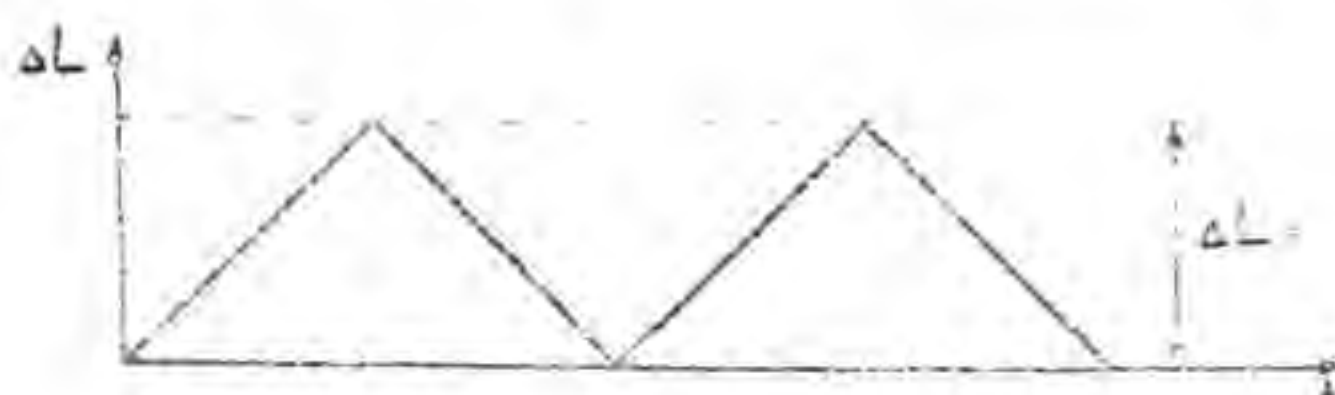


Рис. 5. Залежність змінної складової товщини шару, де всі квантові точки встигли релаксувати

формулою (2):

$$Q(t) = \int_0^{\frac{x_0}{2}(1 - \cos(\pi t))} \left[p - [p - p_{\min}(x)]e^{-\frac{T - 2t_0(x)}{\tau}} \right] dx + \int_{\frac{x_0}{2}(1 - \cos(\pi t))}^{\frac{x_0}{2}} p_{\max}(x)e^{-\frac{T - 2t_0(x)}{\tau}} dx \quad (8)$$

Подальші аналітичні обчислення можливі лише у випадку якщо припустити, що тестовий сигнал можна вважати достатньо малим, а величина $\Delta L(t)$ має форму трикутних імпульсів (див. Рис. 5). Тоді формула (1) буде мати вигляд:

$$\Delta L = \begin{cases} \frac{2\Delta L_0}{T} t, 0 \leq t \leq \frac{T}{2} \\ -\frac{2\Delta L_0}{T} t + 2\Delta L_0, \frac{T}{2} \leq t \leq T \end{cases} \quad (9)$$

Формула (4) перейде у:

$$t_0(x) = \frac{Tx}{2\Delta L_0}, \quad (10)$$

а формула (8) набуде вигляду:

$$Q(t) = \begin{cases} \int_0^{\frac{2\Delta L_0}{T}t} \left[p - [p - p_{\min}(x)] e^{-\frac{t-t_0(x)}{\tau}} \right] dx + \int_{\frac{2\Delta L_0}{T}t}^{\Delta L_0} p_{\max}(x) e^{-\frac{t+t_0(x)}{\tau}} dx, 0 \leq t \leq \frac{T}{2} \\ \int_0^{2\Delta L_0\left(1-\frac{t}{T}\right)} \left[p - [p - p_{\min}(x)] e^{-\frac{t-t_0(x)}{\tau}} \right] dx + \int_{2\Delta L_0\left(1-\frac{t}{T}\right)}^{\Delta L_0} p_{\max}(x) e^{-\frac{t-t_0(x)}{\tau}} dx, \frac{T}{2} \leq t \leq T \end{cases} \quad (11)$$

Для скорочення записів введемо безрозмірні величини: $\frac{T}{\tau} = \alpha$.

$$\frac{x}{2\Delta L_0} = \frac{t_0(x)}{T} = \chi, \quad \frac{t}{\tau} = \theta. \quad \text{Тоді } \frac{t_0(x)}{\tau} = \alpha\chi, \quad \frac{t}{T} = \frac{\theta}{\alpha}.$$

Тоді, переходячи до безрозмірних величин, отримаємо:

$$p_{\max}(\chi) = p \frac{1 - e^{-\alpha(1-2\chi)}}{1 - e^{-\alpha}} \quad (12)$$

$$p_{\min}(\chi) = p \frac{e^{-2\alpha\chi} - e^{-\alpha}}{1 - e^{-\alpha}} \quad (13)$$

Після відповідних підстановок, формула (11) перепишеться у вигляді:

$$Q(\theta) = \begin{cases} 2\Delta L_0 \int_0^{\frac{\theta}{\alpha}} [p - [p - p_{\min}(\chi)] e^{-\theta + \alpha\chi}] d\chi + 2\Delta L_0 \int_{\frac{\theta}{\alpha}}^{\frac{1}{2}} p_{\max}(\chi) e^{-\theta + \alpha\chi} d\chi, 0 \leq \theta \leq \frac{\alpha}{2} \\ 2\Delta L_0 \int_0^{1-\frac{\theta}{\alpha}} [p - [p - p_{\min}(\chi)] e^{-\theta + \alpha\chi}] d\chi + 2\Delta L_0 \int_{1-\frac{\theta}{\alpha}}^{\frac{1}{2}} p_{\max}(\chi) e^{-\theta + \alpha\chi} d\chi, \frac{\alpha}{2} \leq \theta \leq \alpha \end{cases} \quad (14)$$

Тепер проаналізуємо поведінку $p_{\max}(\chi)$ і $p_{\min}(\chi)$ при високих та низьких частотах. При високих частотах $T \rightarrow 0, \alpha \rightarrow 0$. $\downarrow$ $p_{\max}(\chi) \rightarrow p(1-2\chi)$, а $p_{\min}(\chi) \rightarrow p(1-2\chi)$. А при низьких частотах $T \rightarrow \infty, \alpha \rightarrow \infty$. $\downarrow$ $p_{\max}(\chi) \rightarrow p$, а $p_{\min}(\chi) \rightarrow 0$.

Обчислюючи (14) з врахуванням (12) і (13), отримаємо:

$$Q(\theta) = \begin{cases} \frac{2p\Delta L_0}{\alpha} \left(\theta - 1 + \frac{2e^{-\theta}}{1+e^{-\frac{\alpha}{2}}} \right), 0 \leq \theta \leq \frac{\alpha}{2} \\ 2p\Delta L_0 - \frac{2p\Delta L}{\alpha} \left(\theta - 1 + \frac{2e^{\frac{\alpha}{2}}}{1+e^{\frac{\alpha}{2}}} e^{-\theta} \right), \frac{\alpha}{2} \leq \theta \leq \alpha \end{cases} \quad (15)$$

Переходячи до старих змінних, отримаємо:

$$Q(t) = \begin{cases} \frac{2p\Delta L_0}{T} \left(t - \tau + \frac{2\tau e^{-\frac{t}{\tau}}}{1+e^{-\frac{T}{2\tau}}} \right), 0 \leq t \leq \frac{T}{2} \\ \frac{2p\Delta L_0}{T} \left(T - t - \tau + \frac{2\tau e^{\frac{T}{2\tau}}}{1+e^{\frac{T}{2\tau}}} e^{-\frac{t}{\tau}} \right), \frac{T}{2} \leq t \leq T \end{cases} \quad (16)$$

Таким чином частину ємності області просторового заряду напівпровідника можна визначити за формулою:

$$C(t) = \frac{dQ(t)}{dV} = \frac{dQ(t)}{dt} \frac{dt}{d(\Delta L)} \frac{d(\Delta L)}{dV} = \frac{dQ(t)}{dt} \frac{dt}{d(\Delta L)} \frac{dD}{dV}, \quad (17)$$

$$\frac{dQ(t)}{dt} = \begin{cases} \frac{2p\Delta L_0}{T} \left(1 - \frac{2e^{-\frac{t}{\tau}}}{1+e^{-\frac{T}{2\tau}}} \right), 0 \leq t \leq \frac{T}{2} \\ -\frac{2p\Delta L_0}{T} \left(1 - \frac{2e^{\frac{T}{2\tau}}}{1+e^{\frac{T}{2\tau}}} e^{-\frac{t}{\tau}} \right), \frac{T}{2} \leq t \leq T \end{cases} \quad (18)$$

$$\frac{dt}{d(\Delta L)} = \begin{cases} \frac{T}{2\Delta L_0}, 0 \leq t \leq \frac{T}{2} \\ -\frac{T}{2\Delta L_0}, \frac{T}{2} \leq t \leq T \end{cases} \quad (19)$$

Підставляючи вираз (18) та (19) в (17), та враховуючи вираз для $\frac{dD}{dV}$, що був розрахований в роботі [14], отримаємо:

$$C(t) = \begin{cases} p \left(1 - \frac{2e^{-\frac{t}{\tau}}}{1+e^{-\frac{T}{2\tau}}} \right) \frac{dD}{dV}, 0 \leq t \leq \frac{T}{2} \\ p \left(1 - \frac{2e^{\frac{T}{2\tau}}}{1+e^{\frac{T}{2\tau}}} e^{-\frac{t}{\tau}} \right) \frac{dD}{dV}, \frac{T}{2} \leq t \leq T \end{cases} \quad (20)$$

Середнє значення змінної частини ємності області просторового заряду напівпровідника за період можна обчислити за формулою:

$$\langle C(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T C(t) dt \quad (21)$$

В результаті отримаємо наступний вираз:

$$\langle C(t) \rangle = p \left(1 - \frac{th\left(\frac{T}{4\tau}\right)}{T} \right) \frac{dD}{dV} \quad (22)$$

Тоді вираз для ємності напівпровідникової структури з урахуванням впливу рівнів квантових точок буде мати наступний вигляд:

$$C = \frac{e \sqrt{\epsilon \epsilon_0 \left(p_0 + p_1 \left(1 - \frac{th\left(\frac{T}{4\tau}\right)}{T} \right) \right)}}{\sqrt{2 \left(\varphi_0 - \frac{E_1 - \mu}{p_0 + p_1} p_1 - eV \right)}}, \quad (23)$$

або

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2 \left(\varphi_0 - \frac{E_1 - \mu}{p_0 + p_1} p_1 - eV \right)}{\epsilon \epsilon_0 e^2 \left(p_0 + p_1 \left(1 - \frac{th\left(\frac{T}{4\tau}\right)}{T} \right) \right)}, \quad (24)$$

де p_0 – концентрація мілких акцепторних домішок, p_1 – об'ємна концентрація рівнів квантових точок. Всі решта позначень загальновідомі.

На Рис.6 зображено вольт-фарадні залежності для експериментальних даних та теорії (розглянуто випадки низьких та високих частот). Теоретичні залежності розраховано для заданих значень ($p_0 = 10^{22} \text{ м}^{-3}$, $p_1 = 3.5 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$, $\varphi_0 = 0,5 \text{ eV}$, $E_1 = 0,48 \text{ eV}$, $\mu = 0,15 \text{ eV}$, $T = 273 \text{ K}$) в діапазоні від $-0,4 \text{ В}$ до $0,4 \text{ В}$ за формулами (19) і (22).

Як видно з Рис.6, експериментальна крива потрапляє у область даних, яка знаходиться між двома теоретичними залежностями для низьких та високих частот. Це, на нашу думку, означає, що експериментальна крива не описується жодним з двох граничних випадків, а реалізується випадок перехідних(проміжних) частот.

Отже на завершення можна констатувати, що отримані в роботі аналітичні вирази для вольт-фарадних залежностей контакту метал-

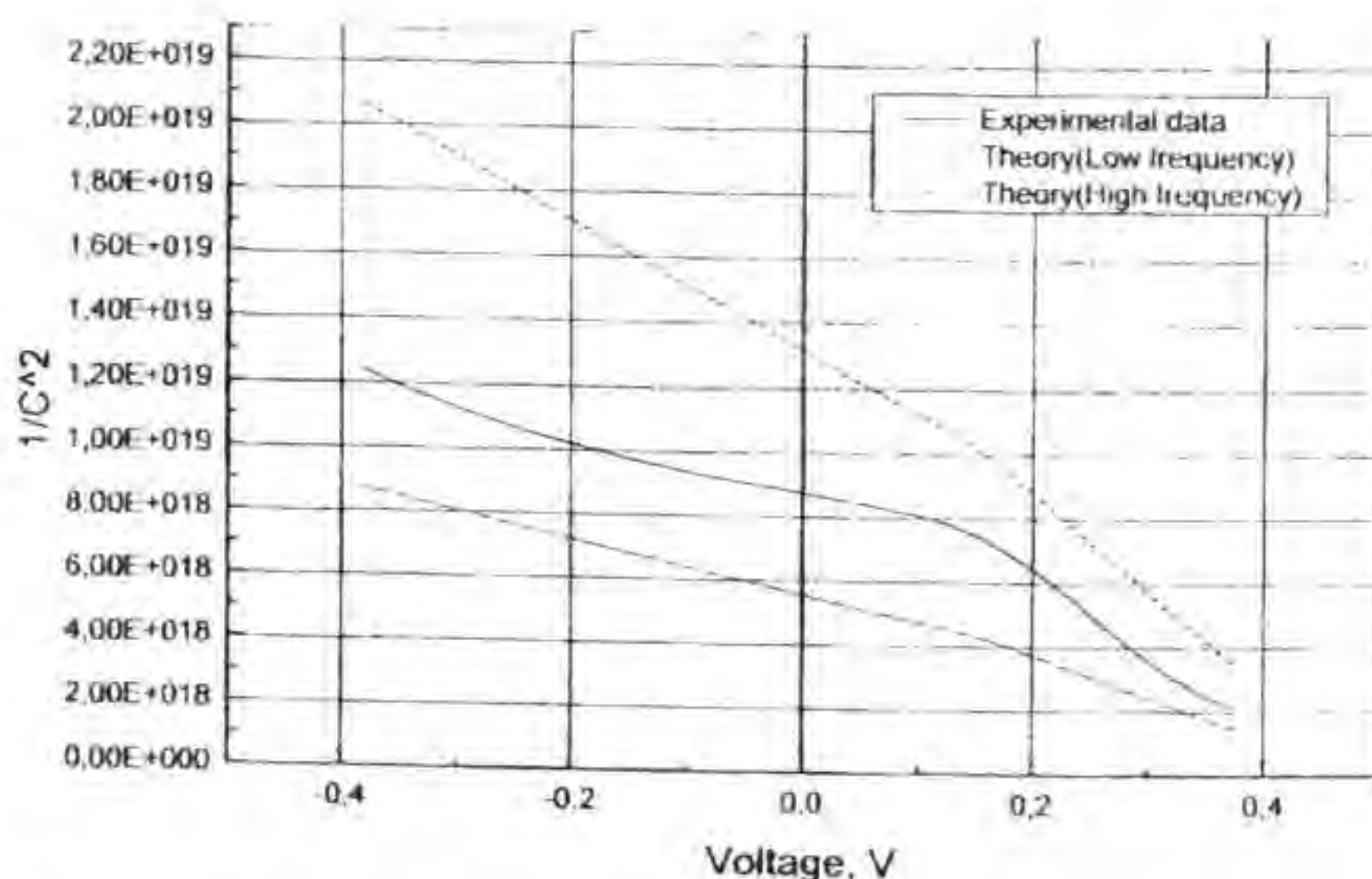


Рис. 6. Залежність $1/C^2(V)$ контакту метал-напівпровідник з урахуванням впливу шарів квантових точок в залежності від частоти.

напівпровідник з урахуванням наявності в ОІІЗ контакту шарів квантових точок на перехідних частотах гарно описують експериментальні $C-V$ залежності. В свою чергу, отримані співвідношення для ємності можуть бути використані для визначення енергетичного положення рівнів квантових точок та їх концентрації в досліджуваних експериментальних структурах.

Література

1. K.Schmalz, I. N. Yassievich, P. Schittenhelm and G. Absteiter. Space-charge spectroscopy of self-assembled Ge-rich dots on Si grown by MBE. // Phys.Rev., - 1999, Vol. 60(3), - P. 1792-1798.
2. C.M.Kaptein, M.Lion, R. Heitz, D. Bimberg et al. Many-particle effects in Ge quantum dots investigated by time-resolved capacitance spectroscopy. // Appl. Phys. Lett., - 2000, Vol. 77(25), - P. 4169-4171.
3. R. H. Blick, R. J. Haug, D. W. van der Weide, K. von Klitzing, and K. Eberl. Photon-assisted tunneling through a quantum dot at high microwave frequencies. // Appl. Phys. Lett., - 1995, Vol. 67(26), - P. 3924-3926.
4. Shang Yuan Ren. Quantum confinement in semiconductor Ge quantum dots. // Solid State Communications, - 1997, Vol. 102(6), - P. 479-484.

5. C. Miesner, O. Köthig, K. Brunner. Mid-infrared photocurrent measurements on self-assembled Ge dots in Si. // *Physica E*, - 2000, Vol. 7, - P. 146-150.
6. J.L. Bischoff, C. Pirri, D. Dentel, L. Simon et al. AFM and RHEED study of Ge/Si(001) quantum dot modification by Si capping. // *Materials Science and Engineering B*, - 2000, Vol. 69-70, - P. 374-379.
7. J. Stangl, T. Roch, V. Holy, M. Pinczolits et al. Strain-induced self-organized growth of nanostructures: From step bunching to ordering in quantum dot superlattices. // *J. Vac. Sci. Technol. B*, - 2000, Vol. 18(4), - P. 2186-2191.
8. C. Miesner, T. Asperger, K. Brunner, and G. Abstreiter. Capacitance-voltage and admittance spectroscopy of self-assembled Ge islands in Si. // *Appl. Phys. Lett.*, - 2000, Vol. 77(17), - P. 2703-2705.
9. O.P. Pchelyakov, Yu.B. Bolkhovityanov, A.V. Dvurechenskii et al. Molecular beam epitaxy of silicon-germanium nanostructures. // *Thin Solid Films*, - 2000, Vol. 367, - P. 75-84.
10. A.I. Yakimov, A.V. Dvurechenskii, A.I. Nikiforov. Formation of zero-dimensional hole states in Ge/Si heterostructures probed with capacitance spectroscopy. // *Thin Solid Films*, - 1998, Vol. 336, - P. 332-335.
11. T. Asperger, C. Miesner, K. Brunner, G. Abstreiter. Admittance spectroscopy of Ge quantum dots in Si. // *Thin Solid Films*, - 2000, Vol. 380, - P. 227-229.
12. J. H. Seok and J. Y. Kim. Electronic structure and compositional interdiffusion in self-assembled Ge quantum dots on Si(001). // *Appl. Phys. Lett.*, - 2001, Vol. 78(20), - P. 3124-3126.
13. В.И.Стриха. Теоретические основы работы контакта металл-полупроводник. — Киев: «Наукова думка», - 1974, - с. 224.
14. V.V. Ilchenko, O.Y. Kondratovich, O.V. Tretyak, M.V. Shkil. Modelling of deep level influence on voltage-capacitance characteristic of metal-semiconductor contact. // *Вісн. Київ. ун-ту, Сер. Радіофізика та електроніка*. - 2005, - 8, - с. 15-17.

Надійшла до редакції 23.01.2006

УДК 537.86:519.22, 537.533

Олександр В. Кисіль,
Андрій В. Коваленко,
Ігор П. Коваль, Віталій Н. Курашов

Надрозрізняюче відновлення сигналів у задачах електронної спектроскопії

Розглянуто можливість над-розрізнення енергетичного розподілу електронів за сигналом електронного спектрометра з обмеженою роздільною здатністю. Запропоновано метод відновлення спектру з використанням діагонального представлення апаратної функції спектрометра. За допомогою комп'ютерного моделювання показано можливість покращення розрізнення у 3 – 3.5 рази. При моделюванні апаратної функції спектрометра використано інтерполяцію експериментальних спектрів пружно розсіяних електронів з первинною енергією 100, 200, ..., 800 eV. Показано задовільну якість такої інтерполяції.

Ключові слова: електронна спектроскопія, надрозрізнення, оптимальна фільтрація.

Oleksandr V. Kysil,
Andriy V. Kovalenko,
Igor P. Koval, Vitalij N. Kurashov

Superresolving signal restoration in problems of electron spectroscopy

Potential of superresolution of energy distribution of electrons from the signal of electron spectrometer with limited resolving ability is considered. The method of spectrum restoration, which applies diagonal representation of spectrometer instrument function, is suggested. 3 – 3.5 times resolution improvement is demonstrated by means of computer simulation. Experimental spectra of elastically scattered electrons with primary energies of 100, 200, ..., 800 eV were interpolated to simulate the instrument function of the spectrometer. The fine quality of such interpolation is demonstrated.

Key words: electron spectroscopy, superresolution, optimal filtering.

Відновлення спектру енергетичного розподілу електронів $N(E)$ за результатами вимірювань в електронному спектрометрі з типовою задачею надрозрізнення і зводиться до розв'язку оберненої задачі для лінійного інтегрального перетворення загального вигляду:

$$I(E') = H\{E', N(E)\} + \eta(E') = \int N(E) h(E', E) dE + \eta(E') \quad (1)$$

де $I(E')$ – струм аналізатора, $h(E', E)$ – апаратна функція спектрометра, $\eta(E')$ – адитивний шум. Всі фізичні величини вважаються приведеними до безрозмірного виду.

Ідеалізована задача відновлення $N(E)$ полягає у визначенні оберненого перетворення H^{-1} , такого, що:

$$H^{-1}\{E, I(E')\} = N(E) \quad (2)$$

і може розв'язуватись різними способами залежно від конкретного вигляду H за умови відсутності випадкових шумів.

Практична задача відновлення полягає у знаходженні оцінки $\tilde{N}(E)$, що задовільно (краще, ніж $I(E' = E)$) описує істинний розподіл $N(E)$. Обмеження на точність розв'язку практичної задачі визначаються впливом адитивного шуму $\eta(E')$, що не може бути усунутим в експериментальних вимірюваннях. Тому з можливих способів розв'язку ідеалізованої задачі для практичних застосувань бажано вибирати такі, що забезпечують стійкість розв'язку відносно шумів та прийнятну точність відновлення [1].

Метою даної роботи є дослідження ефективності методів фільтрації сигналів у власному базисі лінійного несиметричного відображення для надрозрізняючого відновлення спектрів характеристичних втрат у електронно-спектрометричних експериментах.

Розглянемо спочатку ідеалізовану задачу.

Вид апаратної функції спектрометра $h(E', E)$ залежить від багатьох фізичних причин та конструктивних особливостей приладу і тому не може бути представлений аналітично із задовільною точністю. Надалі вважається, що значення функції $h(E', E)$ протабульовані за результатами експериментальних вимірювань [2]. Крім того, експериментально показано, що ядро $h(E', E)$ є неінваріантним відносно зсуву аргументу ($h(E', E) \neq h(E' - E)$) та несамоспряженим ($h(E', E) \neq h^*(E, E')$) [3]. Тому обернене перетворення (2) має будуватись як чисельна процедура, що враховує зазначені властивості ядра прямого перетворення.

Означимо ліве та праве ітеровані ядра $R_l(E_1, E_2)$, $R_r(E'_1, E'_2)$ як:

$$R_l(E_1, E_2) = \int h(E', E_1) h(E', E_2) dE' \quad (3)$$

$$R_r(E'_1, E'_2) = \int h(E'_1, E) h(E'_2, E) dE \quad (4)$$

З означення (3), (4) та обмеженості функції $h(E', E)$ випливає, що $R_{l,r}(E_1, E_2) = R_{l,r}(E_2, E_1)$ та $\int |R_{l,r}(E_1, E_2)|^2 dE_1 dE_2 < +\infty$. Тому існують розв'язки $\phi_j(E)$, $f_j(E')$, $\lambda_j^{l,r}$, $j = 1, 2, \dots$ спектральних задач:

$$\int R_l(E_1, E_2) \phi_j(E_1) dE_1 = (\lambda_j^l)^2 \phi_j(E_2) \quad (5)$$

$$\int R_r(E'_1, E'_2) f_j(E'_1) dE'_1 = (\lambda_j^r)^2 f_j(E'_2) \quad (6)$$

що мають такі властивості:

1. Набори функцій $\{\phi_j(E)\}$, $\{f_j(E')\}$ утворюють ортонормовані базиси у відповідних просторах;
2. $\lambda_j^l = \lambda_j^r \equiv \lambda_j > 0$;
3. перетворення H здійснює відображення $\phi_j \leftrightarrow f_j$, тобто:

$$\int h(E', E) f_j(E') dE' = \lambda_j \phi_j(E) \quad (7)$$

$$\int h(E', E) \phi_j(E) dE = \lambda_j f_j(E') \quad (8)$$

Будемо шукати розв'язок ідеалізованої задачі (2) у вигляді

$$N(E) = \sum_{j=1}^{\infty} n_j \phi_j(E) \quad (9)$$

Представимо вимірюваний сигнал на виході спектрометра його розвиненням у ряд по базисним функціям $\{f_j(E')\}$:

$$I(E') = \sum_{j=1}^{\infty} i_j f_j(E') \quad (10)$$

де

$$i_j = \int f_j(E') I(E') dE' \quad (11)$$

Зазначимо, що набори коефіцієнтів $\{i_j\}$ і $\{n_j\}$ містять всю доступну інформацію про функції $I(E')$, $N(E)$ і повинні тлумачитись як узагальнені спектри останніх. У відповідності з (7), (8) між коефіцієнтами розвинення існує зв'язок $i_j = \lambda_j n_j$, що визначає перетворення спектру сигналу реєструючою системою. Таким чином, послідовність власних чисел $\{\lambda_j\}$ є передаточною характеристикою спектрометра. Тоді відновлення розподілу $N(E)$ в узагальненому спектральному представленні зводиться до елементарної операції:

$$n_j = \frac{i_j}{\lambda_j} \quad (12)$$

Співвідношення (11), (12), (9) визначають обернене перетворення N^{-1} як простий інверсний фільтр $\{\lambda_j^{-1}\}$, застосування якого забезпечує точне відновлення енергетичного розподілу електронів за результатами вимірювань, виконаних з обмеженим розрізненням, за умови нескінченно малого шуму.

Практичне використання процедури простої інверсної фільтрації для відновлення сигналу пов'язане з істотними обмеженнями, що накладаються шумовою компонентою $\eta(E')$. Обов'язкова (хоча б через скінченну точність вимірювань) наявність адитивної випадкової складової у вимірюваному сигналі $I(E')$ є найбільш принциповою відмінністю практичної задачі відновлення від ідеалізованої. Справедливість цього твердження зрозуміла із аналізу співвідношень (1), (11), (12). З останніх випливає, що інверсна фільтрація сигналу $I(E')$ дає в результаті деякий спектр $\{v_j\}$, що є сумою шуканого спектру $\{n_j\}$ та випадкової шумової компоненти:

$$\nu_j = n_j + \frac{\eta_j}{\lambda_j} \quad (13)$$

Так як спектрометр має обмежену роздільну здатність, то його передаточна характеристика спадає у високочастотній області, причому тим швидше, чим нижчим є розрізнення приладу, тобто: $\lambda_j \xrightarrow{j \rightarrow \infty} 0$. Це значить, що випадкова складова необмежено зростає із збільшенням j , що приводить до повного руйнування розв'язку при оберненому перетворенні виду (12). Таким чином, розв'язок практичної задачі відновлення потребує обмеження впливу високочастотних шумів, що може бути виконане заміною інверсного фільтру $\{\lambda_j^{-1}\}$ деяким регуляризованим фільтром $\tilde{H}^{-1}(\lambda_j)$, передаточна характеристика якого, очевидно, має співпадати з $\{\lambda_j^{-1}\}$ в області малих j та спадати до нуля при $j \rightarrow +\infty$:

$$\tilde{H}^{-1}(\lambda_j) \approx \lambda_j^{-1}, \quad \lambda_j > \Lambda_0 \quad (14)$$

$$\tilde{H}^{-1}(\lambda_j) \rightarrow 0, \quad \lambda_j \ll \Lambda_0$$

Величина Λ_0 визначає поділ спектру сигналу на інформативну та зашумлену області і пропорційна ефективному рівню шуму (у випадку білого шуму - його середньоквадратичній амплітуді).

Найпростіший метод регуляризації задачі відновлення полягає у тому, що у розвиненні (9) враховують лише обмежену кількість коефіцієнтів n_j , які відповідають достатньо великим λ_j [4]. Така процедура еквівалентна фільтрації спектру $\{i_j\}$ інверсним режекторним фільтром з передаточною характеристикою

$$\tilde{H}^{-1}(\lambda_j, J_0) = \begin{cases} \lambda_j^{-1}, & j \leq J_0 \\ 0, & j > J_0 \end{cases} \quad (15)$$

Наближений розв'язок $\{\tilde{n}_j\}$ задачі відновлення задається співвідношенням:

$$\tilde{n}_j = \tilde{H}^{-1}(\lambda_j, J_0) \cdot i_j \quad (16)$$

Перехід $\{\tilde{n}_j\} \rightarrow \tilde{N}(E)$ здійснюється перетворенням (9).

Границя режекції J_0 залежить від рівня шуму та швидкості спадання величин власних чисел λ_j і обирається так, щоб у відновленому сигналі шумова складова мала прийнятну амплітуду. Недоліком режекторного фільтру є "розрив" його передаточної характеристики при $j = J_0$, що у багатьох випадках приводить до значних систематичних спотворень

відновленого сигналу. Тому для практичних застосувань бажаним є регуляризований фільтр зі згладженою характеристикою.

Задача побудови оптимально згладженого інверсного фільтру допускає розв'язок для наступної статистичної моделі.

Розглянемо послідовність вимірювань $I_1(E'), I_2(E'), \dots$, що відповідають енергетичним розподілам електронів $N_1(E), N_2(E), \dots$. Вважатимемо, що сукупність усіх можливих реалізацій сигналу $\{N_s(E)\}$ та шум $\{\eta(E')\}$ утворюють взаємно некорельовані центровані випадкові процеси з відомими кореляційними функціями $\langle N(E_1)N(E_2) \rangle$ та $\langle \eta(E'_1)\eta(E'_2) \rangle$ і відповідними матрицями спектральної густини $\langle n_j n_k \rangle$ та $\langle \eta_j \eta_k \rangle$, де кутові дужки позначають усереднення по ансамблю реалізацій. Статистично оптимальним інверсним фільтром будемо називати такий фільтр $\tilde{H}_{\text{opt}}^{-1}(\lambda_j)$, що мінімізує середньоквадратичну по ансамблю похибку відновлення:

$$\sigma^2 = \int \langle |N(E) - \tilde{N}(E)|^2 \rangle dE = \min \quad (17)$$

Будемо шукати розв'язок задачі (17) у вигляді добутку простого інверсного фільтру на деякий регуляризований фільтр W_j :

$$\tilde{H}_{\text{opt}}^{-1}(\lambda_j) = \frac{W_j}{\lambda_j} \quad (18)$$

Тоді задача (17) зводиться до побудови такого фільтру W_j , який оптимальним чином виділяє сигнал n_j із зашумленого інвертованого сигналу ν_j (13):

$$\tilde{N}(E) = \sum_j (W_j \nu_j) \phi_j(E) = \sum_j \left(W_j n_j + W_j \frac{\eta_j}{\lambda_j} \right) \phi_j(E) \quad (19)$$

Відповідно до (9), (17), (19) з урахуванням ортонормованості $\{\phi_j(E)\}$ середньоквадратична похибка набуває вигляду:

$$\sigma^2 = \sum_j \left(\langle n_j^2 \rangle (1 - W_j)^2 + \frac{\langle \eta_j^2 \rangle}{\lambda_j^2} W_j^2 \right) \quad (20)$$

Очевидно, що σ^2 є квадратичною функцією $W_1, W_2, \dots$ і має мінімум, якщо

$$W_j = \frac{\langle n_j^2 \rangle}{\langle n_j^2 \rangle + \frac{\langle \eta_j^2 \rangle}{\lambda_j^2}} \quad (21)$$

Тоді оптимально згладжений інверсний фільтр визначається як:

$$\tilde{H}_{\text{opt}}^{-1}(\lambda_j) = \frac{W(\lambda_j)}{\lambda_j} = \frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + \frac{\langle \eta_j^2 \rangle}{\langle n_j^2 \rangle}} \quad (22)$$

Відношення $\langle \eta_j^2 \rangle / \langle n_j^2 \rangle$ містить параметри адитивного шуму на виході системи і сигналу на вході і тому є незручним для практичного застосування. Тому його бажано замінити деякою константою χ , що може розглядатись як приблизна оцінка співвідношення шум/сигнал на виході системи.

Приведена вище оптимізація інверсного фільтру виконана з припущеннями, що потребують деяких зауважень. По-перше, вважалось, що $\{N_i(E)\}$ утворює центрований випадковий процес, що не відповідає дійсності, оскільки кількість електронів $N(E)$ є величиною невід'ємною. Тому перед застосуванням фільтрації бажано провести попередню обробку результатів вимірювань таким чином, щоб вони відповідали "сигналам" $N(E) - \langle N(E) \rangle$. По-друге, для побудови фільтру (22) необхідно знати діагональні елементи матриці спектральної густини $\langle n_j^2 \rangle$ ансамблю $\{N_i(E)\}$, які насправді ніколи не відомі точно і моделюються із загальних міркувань. При цьому може виявитись, що конкретний відновлюваний сигнал не є типовим представником модельного статистичного ансамблю, а похибка його відновлення істотно перевищує усереднену за всіма реалізаціями. Тому у прикладних застосуваннях корисно проводити порівняльний аналіз результатів відновлення, отриманих за різними методиками, і вибирати ту, що дає найкращі результати у конкретній задачі.

У наших дослідженнях ефективність методів надрозрізнення для задач електронної спектроскопії перевірялась чисельним моделюванням з використанням експериментально отриманих даних про апаратну функцію спектрометра. Остання вимірювалась як спектри пружно розсіяних електронів з розрізненням $\Delta E' = 0.2 \text{ eV}$ для енергій первинного електронного пучка $E = 100, 200, \dots, 1000 \text{ eV}$. Значення апаратної функції для проміжних значень E визначались інтерполяційними методами. Контрольні експериментальні вимірювання показали, що середньоквадратична похибка інтерполяції складала не більше 4% (рис.1).

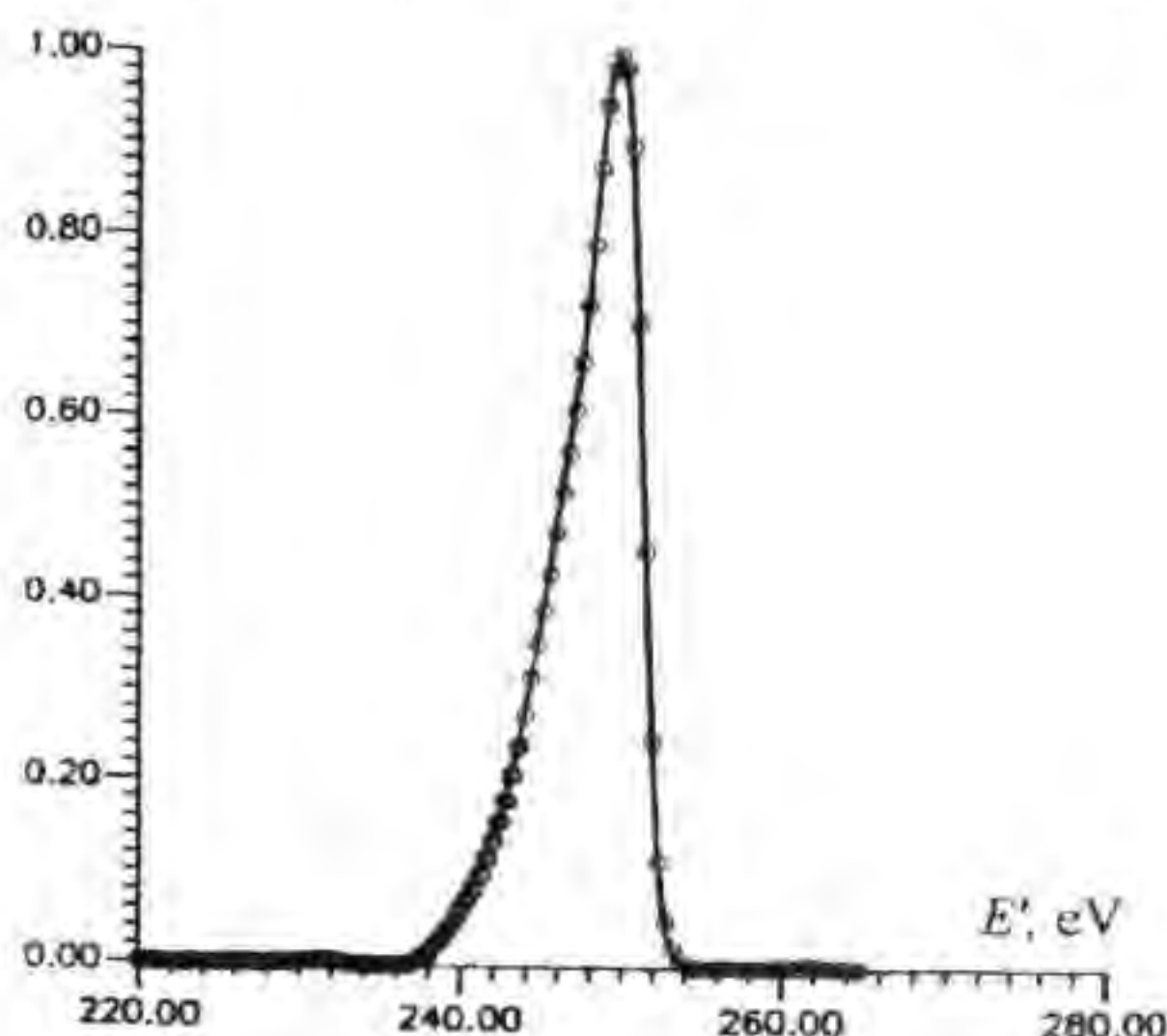


Рис.1. Інтерпольований (—) та експериментальний (oooooo) спектри пружно розсіяних електронів $h(E', E = 250 \text{ eV})$

Роздільна здатність спектрометра у деякому діапазоні енергій $[E_0 - \Delta E; E_0 + \Delta E]$ кількісно характеризується напівшириною його апаратної функції $\sigma_h(E_0)$:

$$\sigma_h^2(E_0) = \frac{\int (E - \bar{E})^2 |h(E_0, E)|^2 dE}{\int |h(E_0, E)|^2 dE} \quad (23)$$

$$\bar{E} = \frac{\int E |h(E_0, E)|^2 dE}{\int |h(E_0, E)|^2 dE} \quad (24)$$

Покращення роздільної здатності при інверсній фільтрації можна оцінити за так само визначеною напівшириною $\sigma_\delta(E_0)$ відновленого спектру моноенергетичного пучка електронів $\tilde{N}_\delta(E_0, E)$:

$$\tilde{N}_\delta(E_0, E) = \tilde{H}^{-1} \left\{ E; \int \delta(E - E_0) h(E', E) dE \right\} \quad (25)$$

На рис.2 представлені результати відновлення спектру пружно розсіяних електронів за допомогою режекторного, та оптимально згладженого фільтрів, параметри яких були обрані відповідними низьким ($< 0.5\%$) значенням рівня шуму. З рисунку видно, що ці фільтри забезпечують приблизно однакове покращення роздільної здатності, що складає $\sigma_h(E_0)/\sigma_\delta(E_0) \approx 3.5$. Спектр, відновлений режекторним фільтром, має бокові пелюстки, що пов'язано із згаданим вище "розривом" передаточної характеристики такого фільтру. Інформація про роздільну здатність інверсного фільтру є корисною при аналізі результатів відновлення: особливості спектру, що відповідають відрізкам $\Delta E < \sigma_\delta$, мають

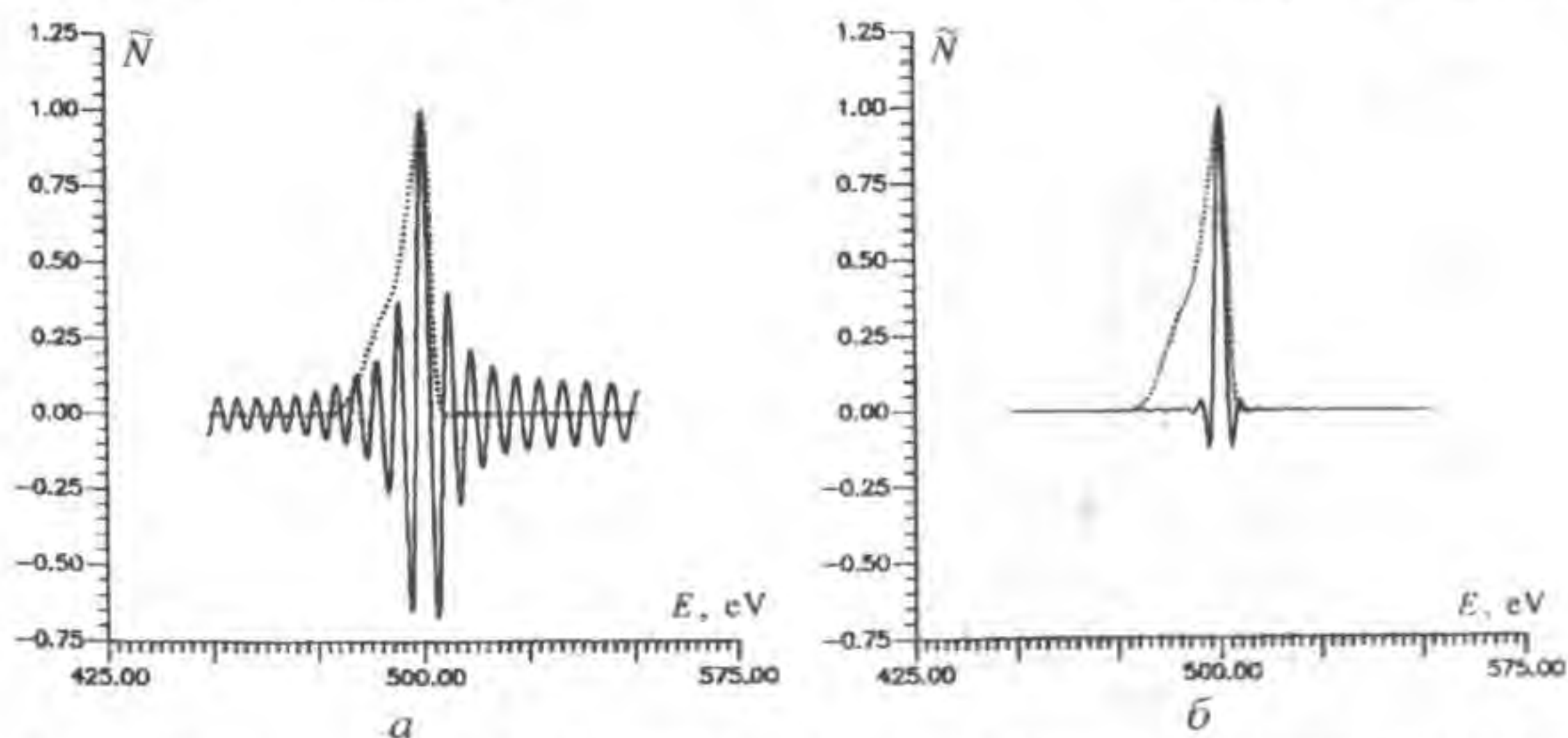


Рис.2. Експериментальні (-----) та відновлені (——) спектри пружньо розсіяних електронів. а) режекторний інверсний фільтр, $J_0=40$; б) оптимальний інверсний фільтр, $\chi=0.05$.

мають тлумачитись як випадкові. Крім того, раціональний підхід до задачі відновлення передбачає попереднє згладжування експериментальних даних. Величина σ_δ дозволяє оцінити максимальне вікно згладжуючого фільтру, використання якого не приводить до втрати корисної інформації.

Стійкість надрозрізняючих процедур перевірялась для оптимально згладженого фільтру на модельному сигналі при рівнях адитивного шуму 1, 5, 10%. Результати показують, що фільтр демонструє високу стійкість і дозволяє впевнено розділити лінії у модельному сигналі (рис.3,4). Зазначимо також, що завищення оцінки рівня шуму χ при відновленні приводить лише до незначного погіршення результатів.

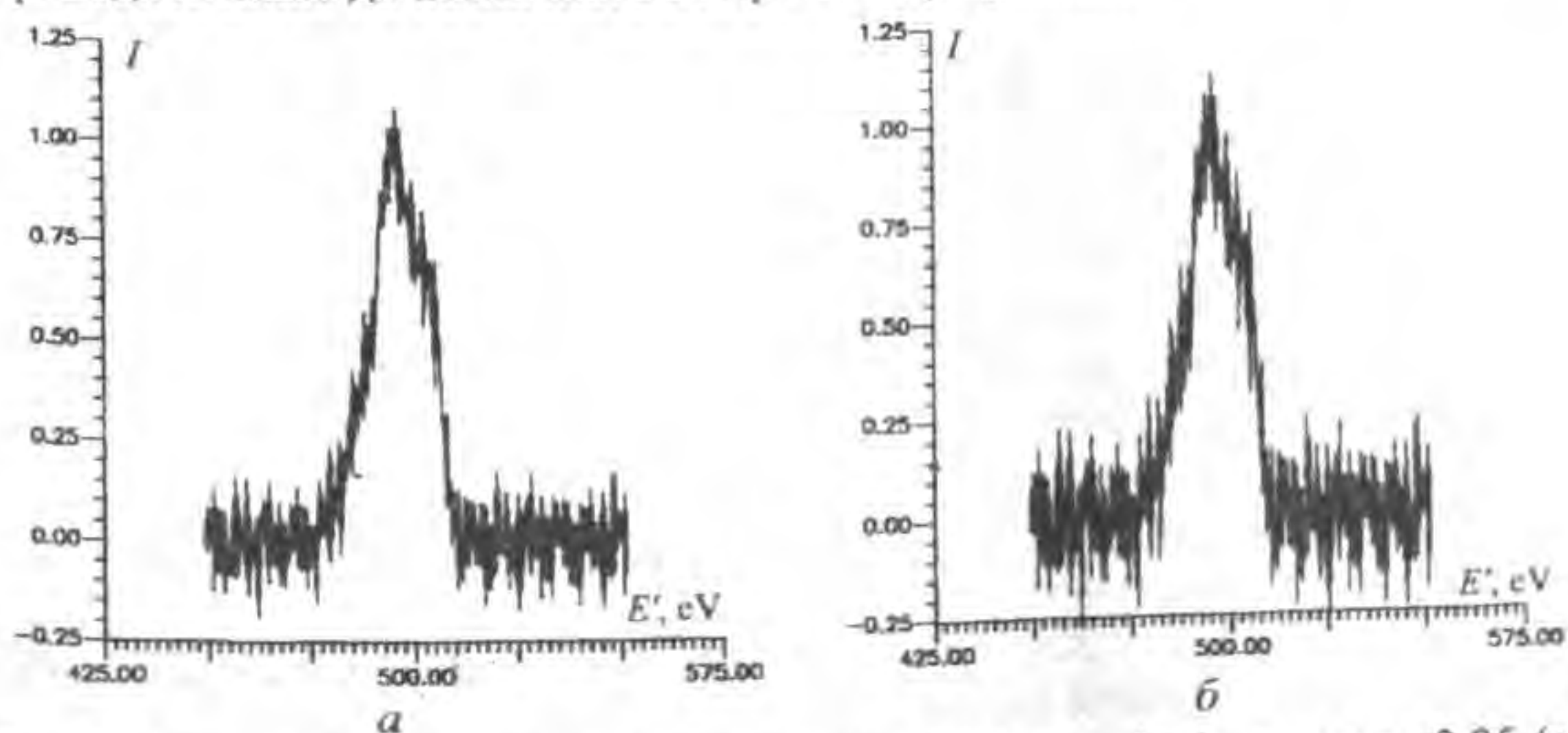


Рис.3. Сигнал електронного спектрометра $I(E')$ для рівнів шуму $\chi=0.05$ (а) та $\chi=0.10$ (б).

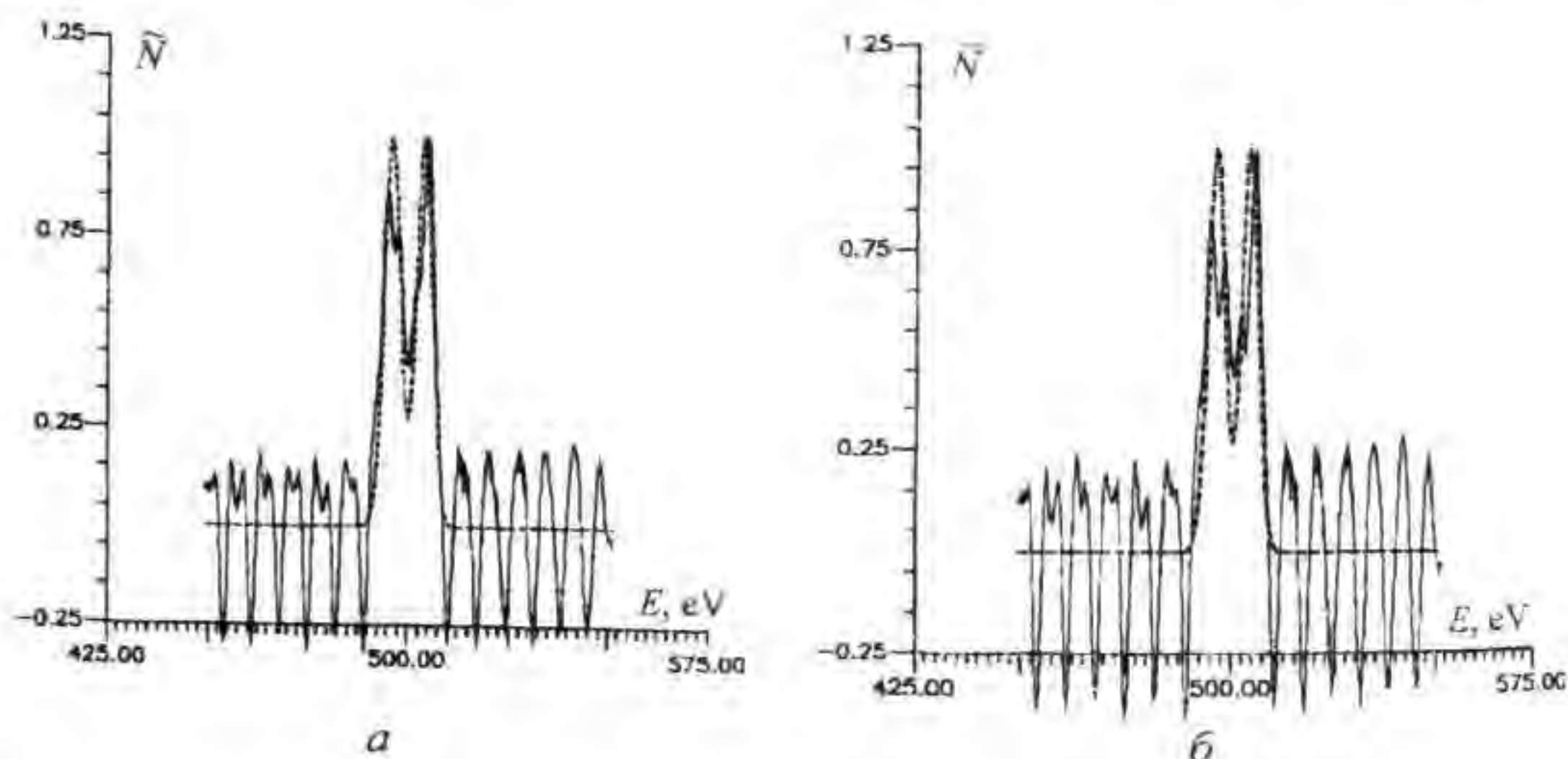


Рис.4. Відновлення розподілу електронів оптимальним фільтром для рівнів шуму $\chi=0.05$ (а) та $\chi=0.10$ (б). "—" - відновлений розподіл $\tilde{N}(E)$, "----" - дійсний розподіл $N(E)$

Отримані результати дозволяють зробити висновок, що використання надрозрізняючих процедур типу регуляризованої оберненої фільтрації може істотно покращити рівень спектрального розрізнення у задачах електронної спектроскопії.

Робота виконана за часткової фінансової підтримки Державного фонду фундаментальних досліджень України, грант 10.01/012.

Література

1. Р.Бейтс, М.Мак-Доннелл. Восстановление и реконструкция изображений. - М.: Мир, 1989. - 336 с.
2. Graduation of electron spectrometer intensity scale. Part 2. How to do it. V.M.Lysenko, V.Ya.Kanchenko, V.S.Andrejchuk, P.V.Melnyk, M.G.Nakhodkin. Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena.v.70, 1995, p.251-257.
3. Атлас ионизационных спектров/ И.Ф.Коваль, В.Н.Тысенко, П.В.Мельник, Н.Г.Находкин; Под ред. Н.Г.Находкина. - К.: Выща шк. Изд-во при Киев. ун-те, 1989. - 232 с.
4. V.N.Kurashov, A.V.Kurashov, A.G.Chumakov. Stable solution of photon-count statistics inverse problem by means of iterated operator eigenfunctions. SPIE Proc., v.2570, 1995, p.347-358.

Надійшла до редакції 20.01 2006

УДК 621.385.833

Ігор П. Коваль*, Юрій А. Лень**,
Микола Г. Находкін

**Дослідження взаємодії кисню з
поверхнею сплаву германій-
кремній методами електронної
спектроскопії**

Методами електронної оже-
спектроскопії та іонізаційної
спектроскопії досліджено взаємодію
кисню з поверхнею сплаву $Si_{0,88}Ge_{0,12}$.
Показано, що германій стимулює
процеси окислення кремнію і
накопичення кисню відбувається
набагато швидше ніж на чистому
кремнії та, поверхні кремнію $Si(001)$
вкритою шарами сурфактантів.
Головну роль в цьому процесі відіграють
поверхневі напруження, які призводять
до стимуляції окислювальних процесів
кремнію.

Ключові слова: адсорбція,
окислення, германій, кремній.

*E-mail: ifk@mail.univ.kiev.ua

** E-mail: len@mail.univ.kiev.ua

Igor P. Koval*, Yuri A. Len**,
Mykola G. Nakhodkin

**Investigation of interaction of the
oxygen with surface of alloy
germanium-silicon by methods of
electron spectroscopy**

Oxygen interaction with surface
 $Si_{0,88}Ge_{0,12}$ alloy has been investigated by
Auger electron spectroscopy and ionization
spectroscopy. It was shown that the
germanium stimulates processes of
oxidation of silicon surface. The main role
in this process play the surface stress
strain, which results in inducing oxidizing
processes of silicon.

Keywords: adsorption, oxidation,
germanium, silicon.

Вступ

Оптимізація рухливості носіїв в каналах в КМОН технології з надкороткими каналами привела до розробки структури з комплексним розслаблено-напруженим шаром Si і напруженим $Si_{1-x}Ge_x$ шаром [1].

Технологія корпорації Intel – технологія напруженого кремнію вперше знайшла застосування в 90-нм технологічному процесі і отримала свій подальший розвиток у 65-нм технології [2]. 65-нм транзистори корпорації Intel мають затвор зі зменшенням до 35 нм розміром і з товщиною підзатворного оксиду приблизно 1,2 нм, що в сукупності забезпечує підвищення продуктивності і знижує активне споживання енергії.

Оскільки формування атомно-контрольованого тонкого SiO_2 шару на кремнієвих поверхнях є критичним для формування і функціонування схем сучасної нанoeлектроніки, процес окислення напружених SiGe-структур, як таких що входять складовою частиною до цих схем, є також важливим. Проте, відома лише невелика кількість робіт, де досліджувались процеси окислення таких структур, до того ж їх результати є суперечливими.

В роботах [3, 4] тонкі шари Ge були сформовані напиленням *in situ* при кімнатній температурі і окисленням. Дослідження окислення 5 Å шару Ge, напиленого при кімнатній температурі, на Si(001) і залежність процесу окислення від температури [3] були виконані за допомогою рентгенівської фотоелектронної спектроскопії. Формування SiO₂ в цих дослідженнях проходило в два етапи. Перший етап полягав в розриві всіх зв'язків Ge-O і формуванні зв'язків Si-O з утворенням переважно субоксидів Si. На другому етапі відбувалась конверсія субоксидів кремнію з утворенням SiO₂. Перший із згаданих етапів відбувався в температурному діапазоні 200-300 °C, тоді як другий – в діапазоні 300-600 °C.

Вивчення взаємодії кисню з покритою Ge поверхнею Si(100)-2x1 за допомогою рентгенівської фотоелектронної спектроскопії (РФС) [4] виявило, що експозиція кисню при 300 K призводить до окислення Ge покриття, з більшою популяцією вищих окислених станів в порівнянні з поверхнями монокристалів Ge(111) і Ge(100) для тих же експозицій в кисні. Данні РФС показують, що після помірного відпалювання кисень, початково зв'язаний з Ge, переходить до Si. При 800 K всі атоми кисню переходять до Si. Експозиція кисню при цій температурі призводить до окислення лише Si, з швидкістю вищою, ніж на поверхні Si вільної від Ge.

Так як напилений Ge не формує добре впорядковані епітаксійні покриття з поверхневою реконструкцією 2x8, на Si(100) [5], то інтерпретація детального механізму реакції кисню з поверхнею Si(100) покритою субмоношаром покриттям Ge, була неоднозначною. Щоб уникнути неоднозначності було приготовлено добре контрольоване за допомогою СТМ епітаксійне моношарове покриття Ge [6]. При вивченні окислення такого покриття в молекулярному кисні було показано, що початковий коефіцієнт прилипання кисню для Ge димерів на поверхні Si(100) був приблизно в 5 разів меншим в порівнянні з чистою поверхнею Si(100). Для епітаксійного моношарового покриття в 2 моношари (МШ) Ge, початковий коефіцієнт прилипання стає подібним до такого для Ge(100) поверхні.

Для пояснення зменшення коефіцієнта прилипання і, відповідно, швидкості утворення оксидів на (1 МШGe)/Si(100) поверхні в порівнянні з поверхнею Ge(100) була висунута гіпотеза про вплив напруження в першому моношарі Ge на Si(100). Через те що епітаксійне покриття Ge, сформоване на Si(100), мало меншу сталу ґратки, ніж на Ge(100) поверхні, то поверхневий шар, особливо димерна структура є стисненою. Енергії активації дисоціації і хемосорбції повинні, таким чином, зростати внаслідок стиснення, призводячи до зменшення реактивної здатності поверхні Ge/Si(100)2x8. Це можна інтуїтивно зрозуміти як утруднення інкорпорації кисню в сильно стиснуті димерні зв'язки германію [7]. Недоліком цієї гіпотези є те, що в ній враховуються лише стискаючі напруження в германії й ігноруються розтягуючі та стискаючі напруження в підкладці.

Метою наших досліджень було з'ясування впливу напружень в приповерхневих шарах кремнієвої підкладки на утворення оксидів кремнію.

Методика експериментальних досліджень

Експериментальні дослідження виконувались у робочій камері надвисоковакуумної установки з безмасляною відкачкою, яка виготовлена на базі серійного оже-спектрометра О9ИОС-2.

Тиск залишкових газів в системі в процесі проведення експерименту не перевищував $10^{-9} - 10^{-10}$ мм рт.ст. Контроль за складом атмосфери залишкових газів в робочій камері надвисоковакуумної установки і за чистотою молекулярного кисню здійснювався за допомогою квадрупольного мас-спектрометра МС-7303. Для експозиції зразків в молекулярному кисні в експериментальній камері нагрівався тигель, в якому знаходився хімічно чистий порошок оксиду міді CuO . Для запобігання появи біля зразка неконтрольованих потоків іонів та збуджених атомів кисню при проведенні експозицій в кисні вимикались нитки розжарювання іонізаційного манометра, електронної гармати, мас-спектрометра тощо.

При проведенні досліджень в якості підкладки використовувався зразок кремній р-типу легований бором із питомим опором 4,5-10 Ом·см і розмірами $5 \times 30 \times 0,3$ мм³. Зразки $\text{Si}(001)$ вирізали із пластини Si і після стандартної хімічної обробки встановлювали у вакуумній камері. Процедура очищення зразка від поверхневих забруднень здійснювалась методом спалаху, коли температура раптово піднімалась до 1200 °С, а далі з інтервалом 5 хв знижувалась на 100 °С до 700 °С і потім поступово до кімнатної.

Аналіз складу поверхні зразків здійснювався за допомогою аналізатору типу циліндричне дзеркало з коаксіальним електронним зондом, струм і діаметр якого залежали від режиму роботи. У процесі роботи вторинно-емісійне зображення поверхні досліджуваних зразків можна спостерігати на екрані монітора і вибирати необхідні ділянки для досліджень. Для мінімізації впливу електронно-стимульованих ефектів окремі вимірювання здійснювали в режимі растра 1×1 мм² та в "віконному" режимі. При цьому не було виявлено суттєвих змін в електронних спектрах, викликаних дією електронного пучка.

Оскільки германій наноситься на поверхню у невеликих кількостях (менших або біля одного МШ), виникала необхідність точного контролю кількості напиленого германію на поверхню $\text{Si}(001)$. Це, в свою чергу, зумовило необхідність проектування та виготовлення оригінального джерела для напилення субмоношарових контрольованих покриттів германію, яке через свою мініатюрність та малу потужність не суттєво змінювало тиск у вакуумній камері. Конструкція напилювача для

напилення контрольованих кількостей германію схематично зображена на рис. 1

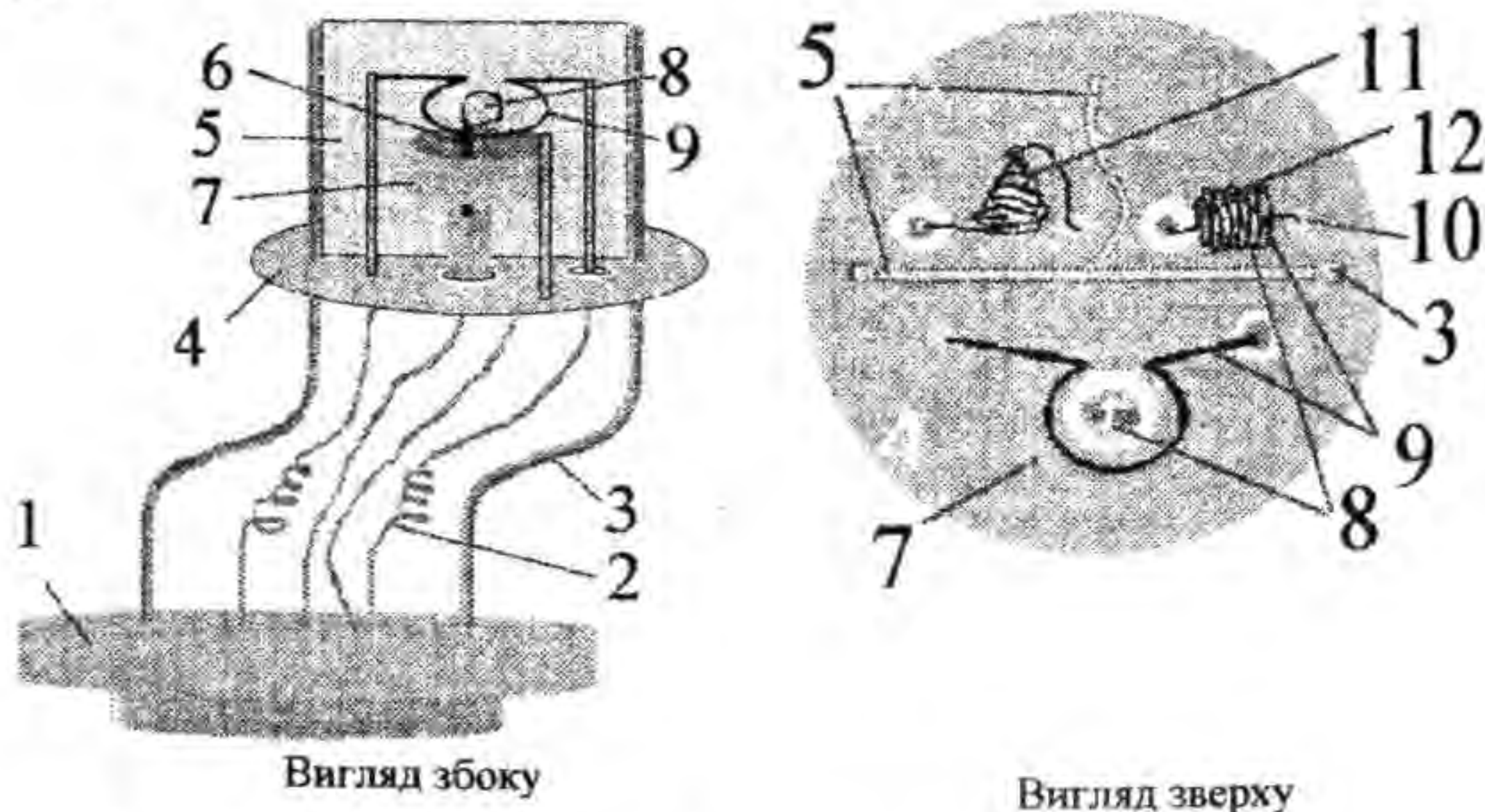


Рис. 1 Напилювач германію. 1 – фланець з контактами (неіржавіюча сталь); 2 – мідні дроти; 3 – тримачі (Мо, дріт $\varnothing$ 3 мм); 4 – столик напилювача (неіржавіюча сталь); 5 – перегородка для запобігання запилення сусідніми напилювачами; 6 – тримач германію (W, дріт $\varnothing$ 0,35 мм); 7 – охоронне кільце, яке запобігає нагріву всього джерела германію; 8 – наважка германію; 9 – катод (W, дріт $\varnothing$ 0,2 мм); 10 – тримачі кокону і спіралі (Мо, дріт $\varnothing$ 3 мм); 11 – кокон (W, дріт $\varnothing$ 0,2 мм) з наважкою Ge; 12 – спіраль (W, дріт $\varnothing$ 0,2 мм) з наважкою германію.

Напилювач являє собою комплекс із трьох джерел. Одне з них – це звитий з вольфрамової проволочки товщиною 0,2 мм коконоподібний кошик (11) діаметром $\approx$ 4 мм, в який вміщувалась наважка германію масою 25-30 мг. Друге – спіраль (12), яка звита з вольфрамової проволочки товщиною 0,2 мм. Перед вміщенням в експериментальну камеру і закріпленням наважки кошики знегажувалися у вакуумі $\sim 10^{-5}$ мм рт.ст. при температурі $> 1000^\circ\text{C}$. Під час напилення германію кошики прогрівалися струмом величиною $\approx 1,7$ А. Це розігрівало їх до температури близької до $600\div 650^\circ\text{C}$, при якій тиск насичених парів германію був $\sim 10^{-2}\div 10^{-1}$ мм. рт.ст. – такі умови забезпечували потік германію, що був необхідним для роботи. Але при застосуванні цього джерела було дуже важко отримати стабільний потік германію. Тому ці джерела використовувалися для нанесення шарів германію після попередньої калібровки нанесеної кількості германію за допомогою джерела з стабільним потоком. Для отримання стабільного потоку в іншому джерелі використовується

нагрівання наважки германію електронним бомбардуванням електронами, емітованими з катода (9) та прискореними різницею потенціалів між катодом та наважкою германію. Стабілізований струм розжарення катода та струм емісії електронів, так само, як і стабілізована прискорююча різниця потенціалів між катодом і анодом-наважкою забезпечували сталу потужність на наважці, а отже і температуру наважки. Швидкість напорошення за оцінками зробленими методом електронної оже-спектроскопії могла варіюватись в межах $10^{-3} - 10^{-1}$ МШ/с. Відстань від кошика та наважки германію з стабільного джерела до поверхні зразка під час напилення германію становила біля 5 см. Ця відстань була вибрана таким чином, щоб, з одного боку, забезпечити просторову рівномірність потоку германію в області зразка і мінімізувати радіаційний нагрів підкладки, а з іншого боку, уникнути надмірних витрат германію під час напилення. На виході джерела була зроблена щільна діафрагма шириною біля 5 мм. За допомогою високовакуумного маніпулятора поверхня зразку кремнію розташовувався на відстані кількох міліметрів від діафрагми. Наявність діафрагми дозволяла напорошувати на центральну частину зразка ступінчасте покриття германію. Чистота покриттів, що напорошувалися, контролювалась методом електронної Оже-спектроскопії. Оглядовий оже-спектр товстої плівки Ge (~ 2 МШ), напиленої на поверхню Si(001) при кімнатній температурі показано на рис.2.

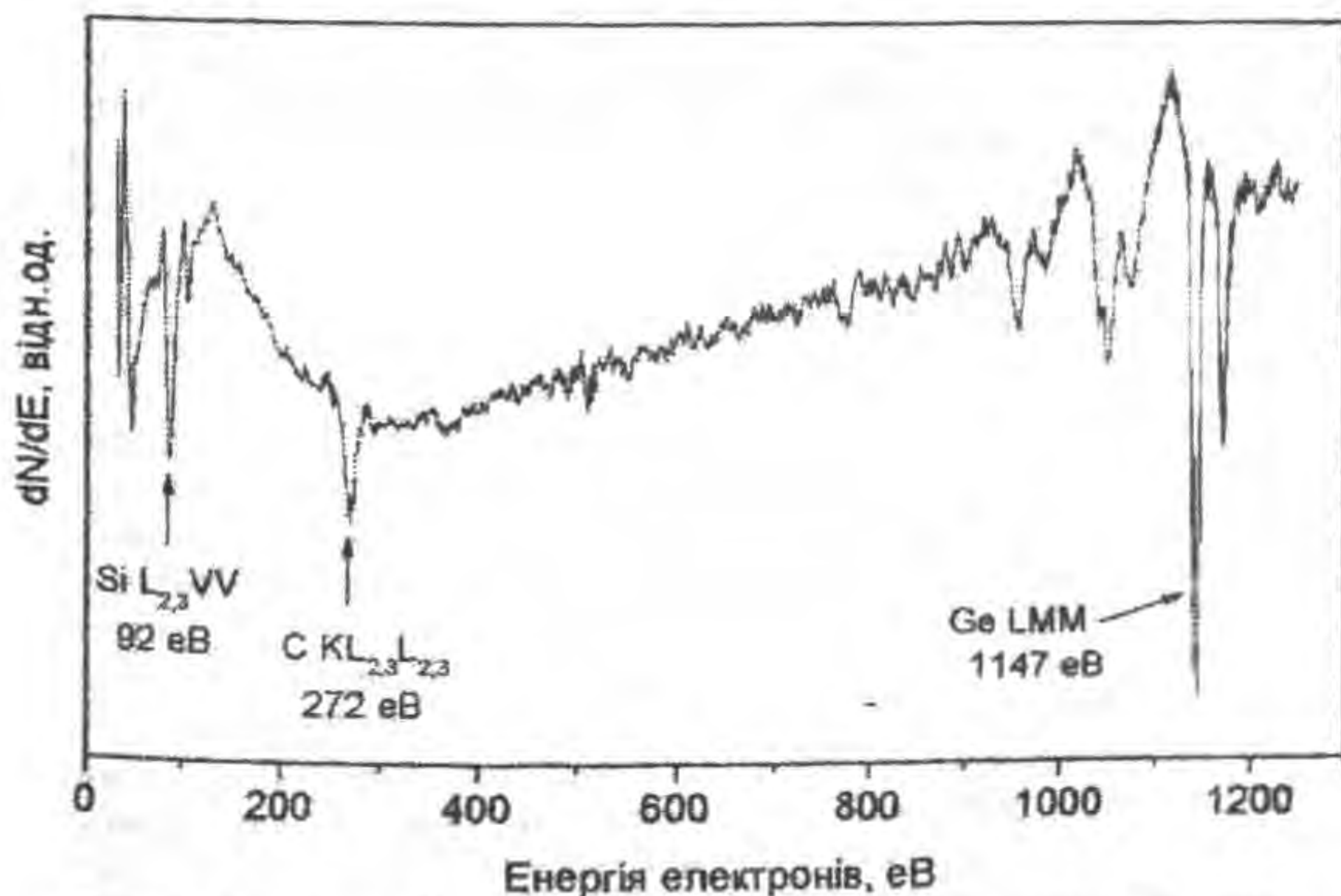


Рис.2 - Оже-спектр поверхні Si(001) з напиленою товстою плівкою Ge (> 1 МШ) при кімнатній температурі.

Видно, що в оже-спектрі присутні оже-лінії кремнію Si LVV (92 eV) та Ge LMM (1147 eV). В оглядовому спектрі також спостерігається оже-лінія вуглецю C KLL (272 eV), поверхнева концентрація якого за кількісними оцінками не перевершує 5% ат. Поява цієї лінії саме в оглядовому спектрі і зростання її інтенсивності з зростанням часу знаходження зразка під електронним пучком свідчить про те, що джерелом вуглецевого забруднення в нашому випадку була електронна гармата, а не джерело германію. Тому в подальшому в процесі контролю поверхні при приготуванні зразків ми мінімізували час перебування досліджуваних поверхонь під пучком шляхом застосування растровання електронного пучка та "віконного" режиму зйому даних оже-спектроскопії.

Результати і їх обговорення

В роботі було проведено порівняння взаємодії молекулярного кисню з вкритою субмоношаровим ($\sim 0,9 - 1,0$ МШ) покриттям Ge та відпаленою при температурі 900°C поверхнею кремнію (001) та чистою поверхнею при великих експозиціях O_2 (від 10^3 до $5 \cdot 10^5$ Л ($1\text{Л} = 1\text{Ленгмюр} = 10^{-6}$ мм.рт.ст./с)) при кімнатній температурі за допомогою методів електронної оже-спектроскопії та іонізаційної спектроскопії.

Після відпалювання зразка з субмоношаровим покриттям Ge при температурі 900°C було одержано поверхневий сплав із стехіометрією $\text{Si}_{0,88}\text{Ge}_{0,12}$. Стехіометрію цього сплаву було визначено за допомогою кількісної оже-спектроскопії методом коефіцієнтів елементної чутливості з урахуванням матричних ефектів [8]. Оцінка глибини шару речовини, з якого емітується 90% найбільш енергетичних LMM оже-електронів германію дає величину $\sim 2,5$ нм. Таким чином, при обрахуванні стехіометрії сплаву $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ми вважаємо, що в межах цього шару стехіометрія є сталою. (Більш строга оцінка неомогенності розподілу германію по глибині можлива при вирішенні рівнянь дифузії для обмеженого джерела.) Ця стехіометрія є типовою при створенні напружених шарів $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ [1]. Залежність відношення інтенсивностей оже-ліній кисню н кремнію ($I_{\text{O}}/I_{\text{Si}}$) від експозиції в молекулярному кисні поверхневого сплаву із стехіометрією $\text{Si}_{0,88}\text{Ge}_{0,12}$ та поверхні Si(001) наведено на рис.3. З рисунку видно, що накопичення кисню на поверхні сплаву $\text{Si}_{0,88}\text{Ge}_{0,12}$ відбувається набагато швидше порівняно з чистим кремнієм та поверхнею кремнію Si(001) вкритою шарами сурфактантів, дослідженою в [9]. Причини цього буде з'ясовано в подальшому при моделюванні цієї системи методами квантовохімічних розрахунків. Поки що цей факт є ще одним підтвердженням нашої гіпотези про вирішальний вплив розтягуючих поверхневих напружень, які і сприяють розриву зв'язків Si-Si і утворенню оксидів кремнію [10]. Слід відзначити, що значення $I_{\text{O}}/I_{\text{Si}} \geq 0,25$, яке ми

спостерігали в $\text{Si}_{0,88}\text{Ge}_{0,12}$ для експозицій, починаючи з 10^3 Л є типовим індикатором утворення насиченого оксиду SiO_2 [9].

Для з'ясування фазового складу оксидів кремнію нами був застосований метод іонізаційної спектроскопії.

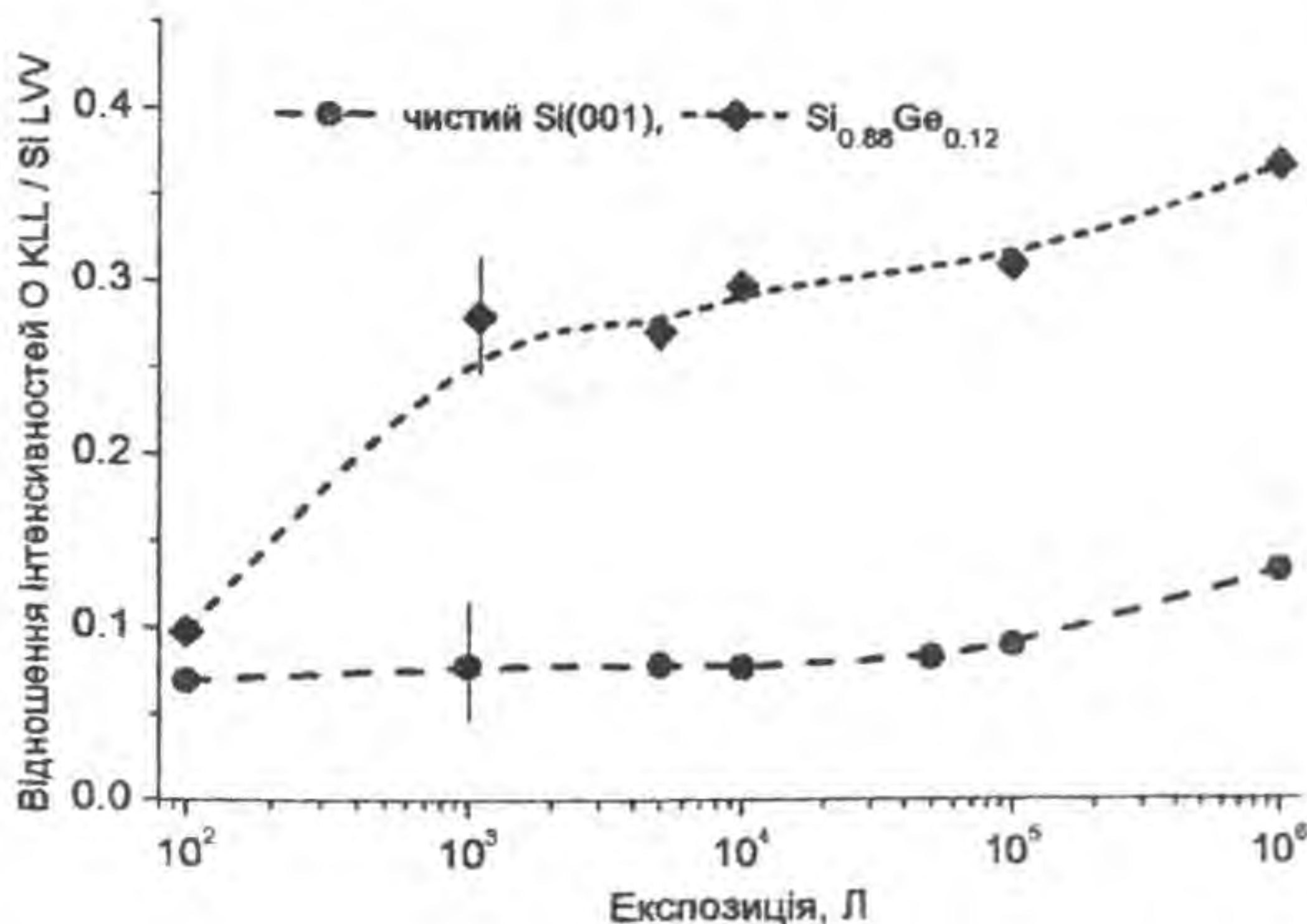


Рис.3 - Залежність відношення інтенсивностей оже-ліній $I_{\text{O}}/I_{\text{Si}}$ від експозиції O_2 в логарифмічному масштабі.

На рис.4 показані ділянки іонізаційних Si $L_{2,3}$ ліній кремнію до і після дії на них молекулярного кисню для поверхонь Si(001) та $\text{Si}_{0,88}\text{Ge}_{0,12}$.

Як видно з цього малюнка форма та положення іонізаційної лінії для неокисленої поверхні сплаву $\text{Si}_{0,88}\text{Ge}_{0,12}$ збігається з формою і положенням для іонізаційних ліній чистого кремнію, наведених в [11].

При експозиції в молекулярному кисні 1×10^5 Л поверхні в іонізаційних спектрах цієї системи спостерігається додаткова лінія з втратою енергії 107,5 еВ. Значення енергетичної втрати $L_{2,3}$, що дорівнює 107,5 еВ, відповідає утворенню оксиду кремнію SiO_2 і узгоджується із аналогічним значенням, що було вперше одержано в [12]. Товщина шару діоксиду кремнію, що утворюється при оксидуванні в молекулярному кисні при кімнатній температурі визначена по енергетичним залежностям іонізаційних ліній становить 0,35 – 0,4 нм [12]. Для порівняння на цьому ж малюнку наведено іонізаційний спектр поверхні Si(001), отриманий в тому ж експерименті поза межами п'ятна напорошувача, після тієї ж експозиції

в кисні. Видно, що в цьому спектрі спостерігається лише слабкий наплив з боку більших втрат енергії (104,5 eV). Така зміна форми іонізаційної лінії притаманна утворенню ненасичених оксидів SiO_x ($x < 2$) [12].

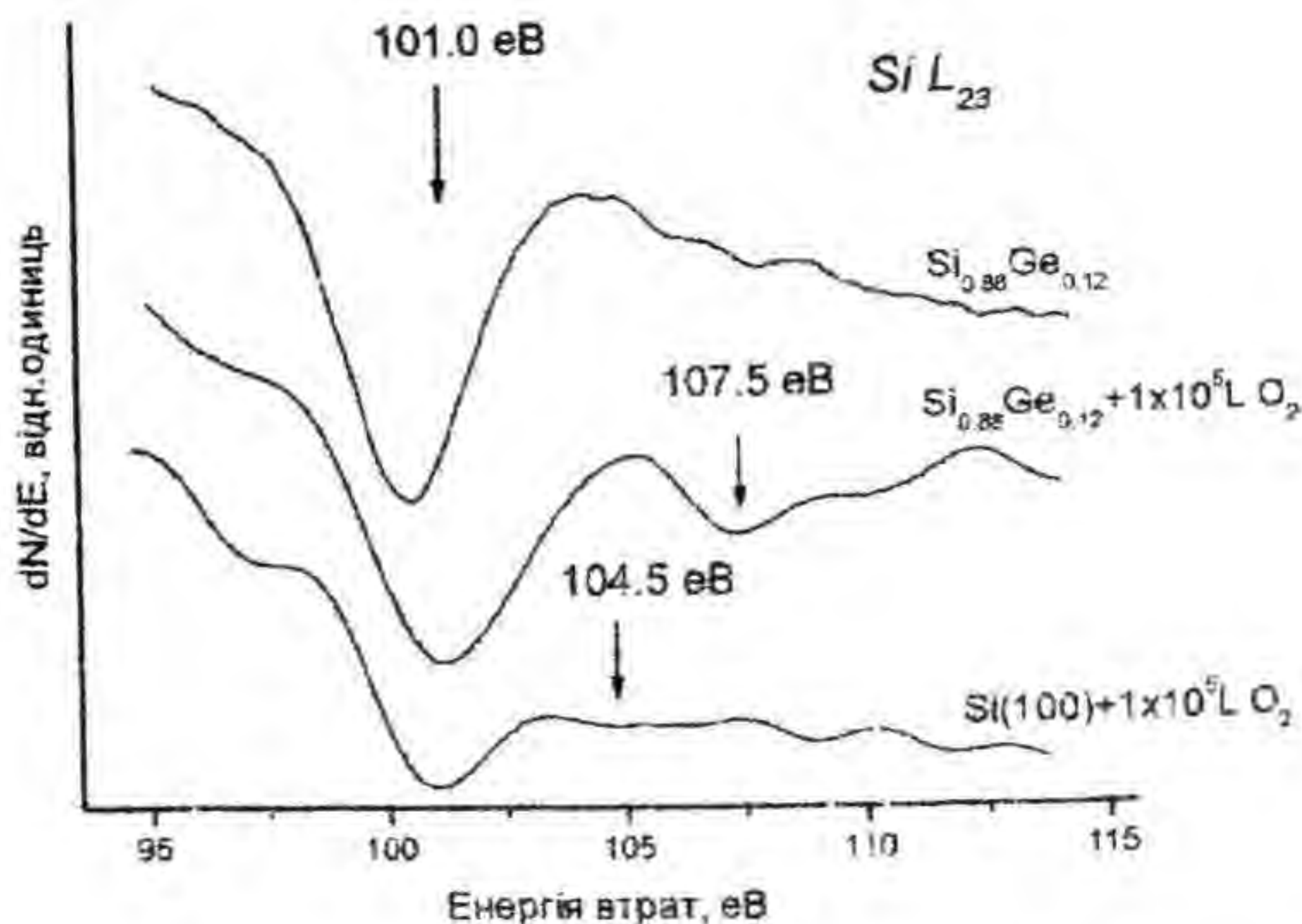


Рис.4 - Іонізаційні лінії Si ІІ L_{2,3} до і після експозиції в молекулярному кисні 10^5 L O_2

Висновки

Розроблено і виготовлено напилювач з контрольованою швидкістю напилення в межах $10^{-3} - 10^{-1}$ МШ/с для створення субмоношарових покриттів германію для досліджень його *in situ* у обмежених експериментальних вакуумних об'ємах, у яких не відчувається зміна базових тисків при його роботі.

Адаптовано метод визначення фазового складу оксидів кремнію по формі і енергетичному положенню іонізаційної лінії Si L_{2,3} до системи $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

Експериментально встановлено, що накопичення кисню на поверхні сплаву $\text{Si}_{0.88}\text{Ge}_{0.12}$ відбувається в формі насиченого оксиду кремнія і накопичення кисню відбувається набагато швидше ніж на чистому кремнії та на поверхні кремнію Si(001), вкритою шаром сурфактантів [9]. Це є ще одним підтвердженням нашої попередньої гіпотези [10] про вирішальний

вплив поверхневих напружень, які сприяють розриву зв'язків Si-Si і утворенню оксидів кремнію.

Робота виконувалась згідно плану робіт по темі 01БФ052-02 при частковій підтримці Міністерства освіти та науки України (грант № М/240-2004).

Література:

1. Wang Y.P., Wu S.L., Chang S.J. Optimized Si-Cap Layer Thickness for Tensile-Strained-Si/Compressively Strained SiGe Dual-Channel Transistors in 0.13 μm Complementary Metal Oxide Semiconductor Technology. // Japanese Journal of Applied Physics. – 2005. – Vol. 44, № 40. – P. L1248–L1251.
2. <http://www.intel.com/technology/silicon/sil2031.htm>
3. Prabhakaran K., Ogino T. Bonding partner change reaction in oxidation of Ge on Si(001): Observation of two step formation of SiO_2 . // Applied Physics Letters. – 1994. – V.64, № 14. – P.1839 – 1841.
4. Boishin G., Tyuliev G., Surnev L. XPS study of oxygen interaction with a Ge-covered Si(100) surface. // Surface Science. – 1994. – V.303, Issue 3. – P.333–340.
5. Surnev S. Oxygen adsorption on a Ge dosed Si(100) surface. // Surface Science. – 1992. – V.278, Issue 3. – P.375 – 382.
6. Fukuda T., Ogino T. Oxygen adsorption on Ge-covered Si(100) surfaces. // Surface Science. – 1996. – V.357–358. – P.748 – 752.
7. Fukuda T. Initial oxygen interaction between Ge(100) and Ge/Si(100) surfaces compared by scanning tunneling microscopy. // Japanese Journal of Applied Physics. – 1999. – V.38, Part 2, № 12A. – P.L1450– L1452.
8. Атлас оже-спектров чистых материалов // Рязань НИИ. 1984 – 116с.
9. Коваль І.П., Лапоша В.В., Лень Ю.А., Находкін М.Г. Адсорбція молекулярного кисню на поверхні Sb/Si(001). // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат.науки. – 2002. – Випуск 4. – С.307–313.
10. Афанас'єва Т.В., Коваль І.П., Лень Ю.А., Находкін Н.Г. Взаємодія молекулярного кисню з поверхнею Si(100), вкритою субмоношаром сурми.// Український Фізичний Журнал – 2005. – Т.50, № 7. – С.685 – 690.
11. Атлас ионизационных спектров. / Под ред. Н.Г. Находкина. – Киев: Выща школа. Изд-во при Киев.ун-те, 1989. – 232с.
12. Коваль И.Ф., Крынько Ю.Н., Мельник П.В., Находкин М.Г., Гойса С.Н. Исследование фазового состава окислов кремния методами электронной спектроскопии. // Физика твердого тела. – 1977. – Т.19, № 9. – С.1681–1683.

Надійшла до редакції 21.12.2005

УДК 519.9

Олександр Ю. Кравченко

Взаємодія шару пилових частинок з плазмою

В рамках гідродинамічної моделі проводиться числове моделювання взаємодії шару нерухомих пилових частинок з оточуючою плазмою. Одержані стаціонарні просторові розподіли параметрів плазми при різних розмірах та концентраціях пилових частинок. Показано, що на границі пилового згустку можуть утворюватись нелінійні шари просторового заряду, які викликають ефект "бунчіровки" при еволюції нелінійної хвилі і утворення нелінійних дисипативних структур.

Ключові слова: запыленная плазма, числове моделювання, гідродинамічні рівняння.

¹ E-mail: kau@univ.kiev.ua

Oleksandr Yu. Kravchenko

The Interaction of a Dust Layer with Plasma

It is performed the numerical simulation of the interaction of dust particles layer with plasma in the hydrodynamic approach. It is obtained the stationary space distributions of plasma parameters at different radii and concentrations dust particles. It is shown that non-linear layers of space charge can be generated at the boundary of dust layer.

Key Words: dusty plasma, numerical simulation, hydrodynamic equations.

Пилова плазма, яка складається з електронів, іонів та заряджених пилових частинок останнім часом є предметом інтенсивних досліджень. Це обумовлено широким розповсюдженням такої плазми в космосі [1,2], лабораторних експериментах та промислових установках плазмового травлення для створення комп'ютерних мікросхем, нанесення плівок [3,4]. Проведені експериментальні дослідження показали, що для пилової плазми характерною рисою є її самоорганізація, яка приводить в ряді випадків до утворення пилових згустків з вільною границею [4], в яких пилові частинки можуть утворювати регулярну структуру. Це обумовило значний інтерес до вивчення поведінки пилових згустків у плазмі [5,6]. При цьому, для аналізу електронної та іонної компонент плазми авторами використовувались рівноважні розподіли Больцмана в силу великої різниці характерних часів, які визначають рух пилових частинок та іонів і електронів. Справедливість таких припущень базується на припущенні про максвелівську функцію розподілу іонів та електронів. Проте, при досить високій концентрації пилу процеси осідання іонів та електронів на поверхню пилинок суттєво впливають на їх розподіли по енергії. Особливо це стосується іонів, оскільки пилові частинки здебільшого заряджаються негативно і можуть формуватись значні потоки іонів, направлені в область

пилового згустку. Це може суттєво змінити динаміку пилових частинок, оскільки виникають сили іонного тертя.

Метою даної роботи є комп'ютерне моделювання взаємодії плазми з одновимірним шаром пилових частинок, який має вільну границю. Нас буде цікавити можливість утворення стаціонарного стану плазми. При цьому будемо розглядати іонні часи задачі і вважати пилові частинки нерухомими, оскільки їх маса набагато більша за масу електронів та іонів.

Модель задачі та метод числового моделювання.

Розглянемо плоский шар пилових частинок, що знаходиться в безмежній сильно іонізованій плазмі. В наших розрахунках будемо вважати, що концентрація пилинок визначається формулою

$$n_d = n_{d0} \quad \text{при} \quad -L_{d0} \leq x \leq L_{d0} \quad ; \quad n_d = n_{d0} \exp\left(-(x - L_{d0})^2 / \sigma\right) \quad \text{при} \quad |x| > L_{d0}.$$

Параметр L_{d0} визначає півширину пилового шару, а параметр σ - ширину його границі.

При взаємодії з плазмою пилінки набувають деякого заряду і тим самим приймають участь у формуванні потенціалу самоузгодженого електричного поля φ , який описується рівнянням Пуасона

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\frac{e}{\epsilon_0} [n_i - n_e + q_d n_d] \quad (1)$$

де n_i, n_e, n_d - концентрації іонів, електронів та пилових частинок, q_d - заряд пилової частинки.

Зміна заряду пилової частинки q_d описується рівнянням

$$\frac{dq_d}{dt} = I_e + I_i \quad (2)$$

де електронний та іонний струми I_e та I_i на пилінку згідно з теорією зонду записуються у вигляді [7]

$$I_e = -\pi a^2 e \left(\frac{8kT_e}{\pi m_e} \right)^{1/2} n_e \exp\left(\frac{eq_d}{akT_e} \right), \quad (3)$$

$$I_i = \pi a^2 e n_i \left(\frac{8kT_i}{\pi m_i} + v_i^2 \right)^{1/2} \left(1 - \frac{eq_d}{a(8kT_i / \pi m_i + m_i v_i^2 / 2)} \right), \quad (4)$$

Оскільки ми будемо цікавитися характерними часами, значно більшими за період електронних коливань, то для концентрації електронів вважатимемо справедливим розподіл Больцмана

$$n_e = n_{e0} \exp\left(\frac{e\varphi}{kT_e}\right) \quad (5)$$

де n_{e0} - концентрація електронів в незбуреній плазмі на нескінченності.
При цьому, ми нехтуємо зіткненнями електронів з іонами та нейтральними атомами, вважаючи їх концентрації малими.

Для іонів будемо користуватись рівняннями холодної гідродинаміки:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_i \frac{\partial v_i}{\partial x} = -\frac{e}{m_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial(v_i n_i)}{\partial x} = -I_i n_d \quad (7)$$

де v_i , e , m_i - гідродинамічна швидкість, заряд та маса іонів. Зазначимо, що ми нехтуємо іонним тиском в рівнянні руху, оскільки температура іонів значно менша за температуру електронів.

Член в правій частині рівняння неперервності характеризує осадження іонів на пилових частинках.

Систему рівнянь (1)-(7) доповнюємо наступними граничними та початковими умовами:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0 \text{ при } x \rightarrow \pm\infty, \quad (8)$$

$$n_i = n_0, v_i = 0 \text{ при } x \rightarrow \pm\infty, \quad (9)$$

$$v_i = 0, n_i = n_0, q_d = q_{d0} \text{ при } t = 0 \quad (10)$$

де q_{d0} - деякий початковий заряд пилових частинок.

Якщо ввести безрозмірні величини

$$\xi = \frac{x}{\lambda_d}, \psi = \frac{e\varphi}{kT_e}, Q_d = \frac{q_d}{e}, N_d = \frac{n_d}{n_0}, N_i = \frac{n_i}{n_0}, N_e = \frac{n_e}{n_0}, V_i = \frac{v_i}{c_s} \tau = t\omega_{pe}$$

то рівняння (1)-(7) приймуть вигляд

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} = -[N_e - N_i + Q_d N_d] \quad (11)$$

$$N_e = \exp(\psi) \quad (12)$$

$$\frac{dQ_d}{d\tau} = \pi A^2 l_s \sqrt{\frac{8}{\pi}} \left(\sqrt{T_e} N_i \left(1 - \frac{Q_d}{4\pi A l_s T_e} \right) - N_i \exp\left(\frac{Q_d}{4\pi A l_s T_e}\right) \right) \quad (13)$$

$$\frac{\partial V_i}{\partial \tau} + V_i \frac{\partial V_i}{\partial \xi} = -\frac{\partial \psi}{\partial \xi}, \quad (14)$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial \tau} + \frac{\partial(V_i N_i)}{\partial \xi} = -I_i N_d \quad (15)$$

Система рівнянь (11)-(15) розв'язувалась чисельно методом кінцевих різниць. При цьому для інтегрування рівнянь (14)-(15) використовувалась схема Лакса-Вендроффа [10], а рівняння (11) інтегрувалось за допомогою ітераційного методу Ньютона.

Зазначимо, що приведена модель включає декілька параметрів: T_i , N_d , A та I_n . Вони характеризують відповідно відношення температур іонів і електронів, відношення концентрації пилових частинок в центрі згустку до концентрації електронів на нескінченості, відношення радіусу пилових частинок до електронного дебаївського радіусу в незбуреній плазмі та кількість електронів в дебаївському кубі в незбуреній плазмі.

Результати та їх обговорення

Розглянемо тепер результати розрахунків. На рис.1 представлені просторові розподіли швидкості (а), концентрації іонів (б) та напруженості самоузгодженого електричного поля (в) в різні моменти часу для варіанту з $T_i = 0.03$, $I_n = 100$, $A = 0.1$, $N_{d0} = 0.0001$.

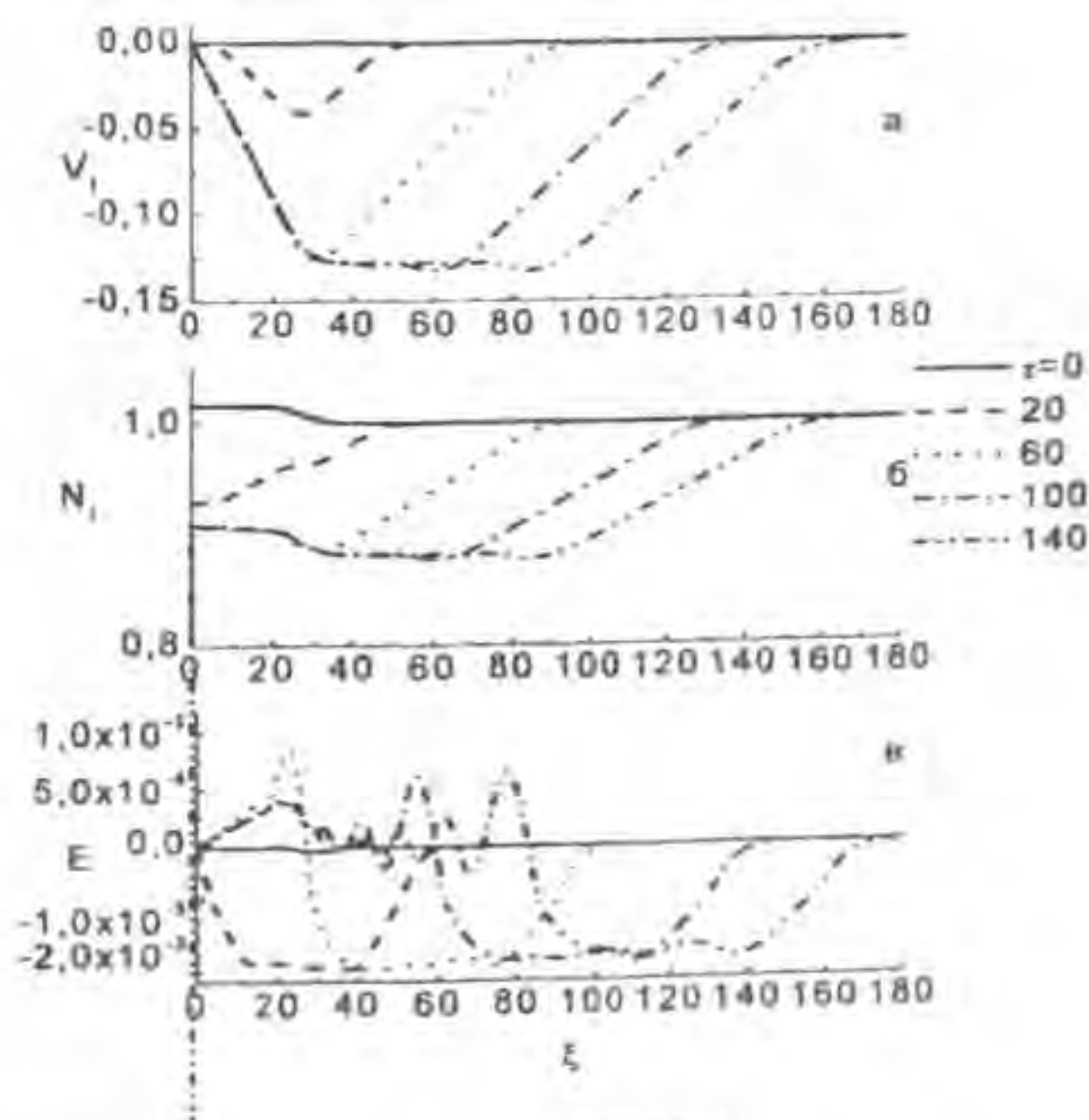


Рис.1

Зображені результати демонструють встановлення з часом стаціонарних розподілів параметрів плазми в області пилового шару. Видно, що від границі пилового шару ($\xi = 30$) в напрямку незбуреної плазми розповсюджується хвиля розрідження, в якій напруженість електричного поля негативна. Вона приводить до виникнення потоку іонів, направленного в область, зайняту пиловими частинками. Розподіли концентрації та швидкості іонів в цій області лінійні. В області пилового шару напруженість поля стає додатною, швидкість іонів по лінійному

закону спадає до нуля, а концентрація іонів зростає на границі і залишається практично постійною в центральній частині пилового згустку. З рисунку видно, що стаціонарний профіль концентрації іонів в цьому режимі не відрізняється від одержаного в рамках моделі рівноважних іонів, в той час як залежність напруженості електричного поля від координати має інший вигляд. Ця відмінність обумовлена осадженням іонів на пилових частинках, внаслідок чого для підтримання стаціонарного стану повинен існувати іонний потік з оточуючої плазми в область пилового шару. Додатне поле всередині пилового шару необхідне для гальмування цього потоку.

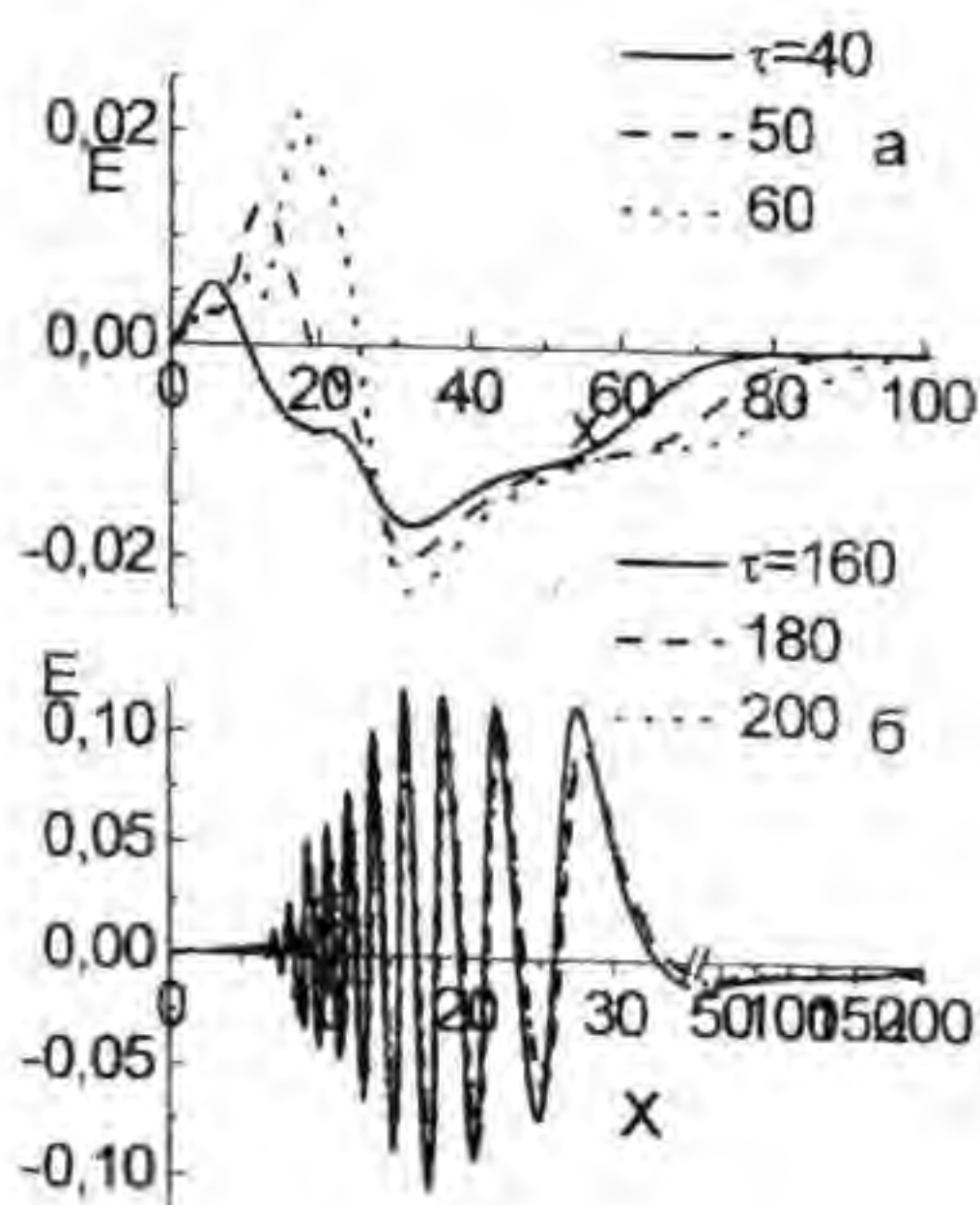


Рис.2.

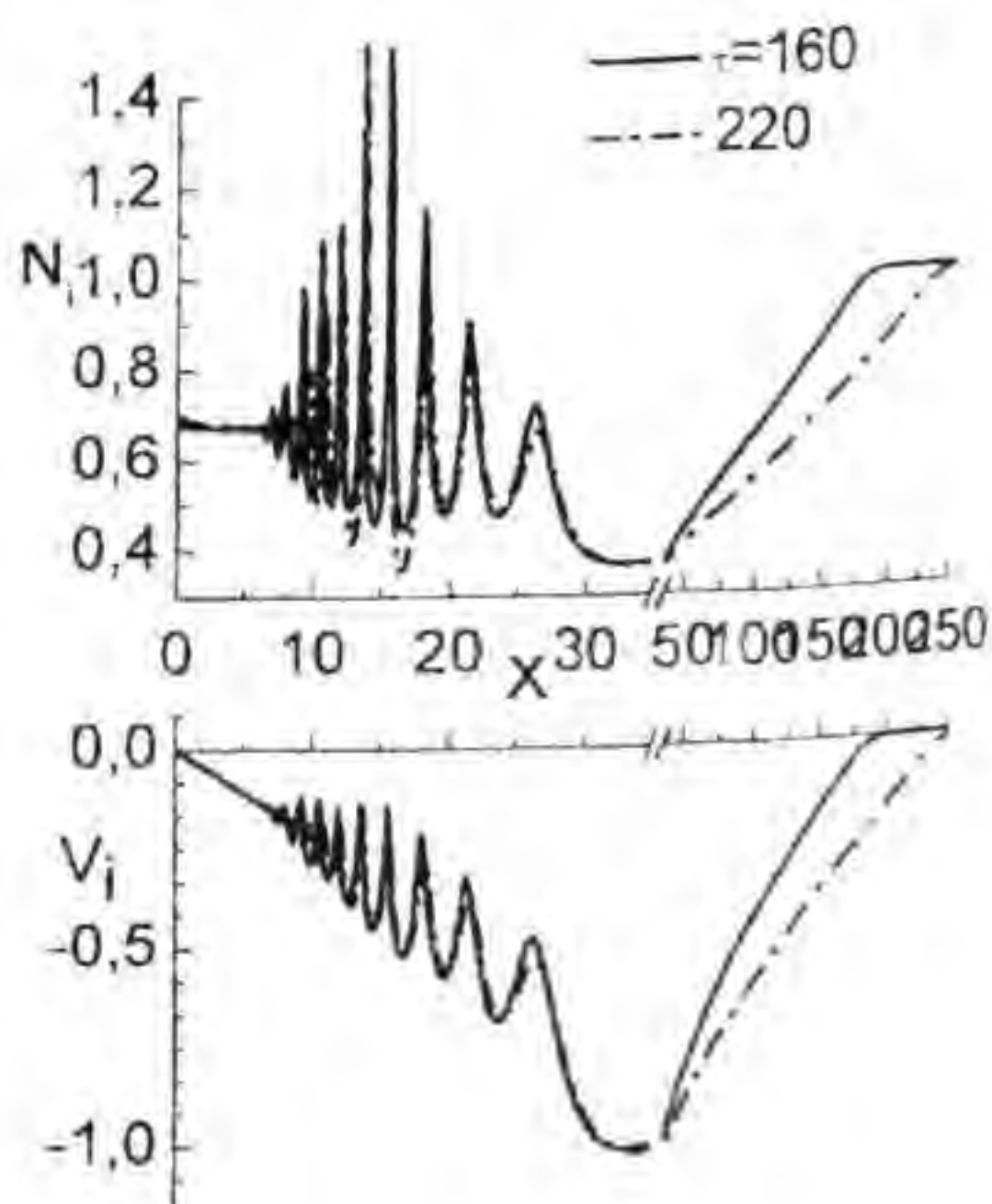


Рис.3.

На рис.2,3 зображені просторові розподіли параметрів плазми, одержані для варіанту $T_e = 0.03$, $I_a = 100$, $N_{a0} = 0.0005$, $A = 0.1$. Збільшення концентрації пилових частинок, в порівнянні з попереднім варіантом, приводить до більш інтенсивного осадження іонів на пилинках. Очевидно, що в цьому режимі повинен існувати більший іонний потік всередину пилового шару. Для його виникнення не достатньо слабого електричного поля, що виникає в квазінейтральній області хвилі розрідження. Внаслідок цього, біля границі пилового шару утворюється область подвійного шару і, відповідно, більш сильного електричного поля. Це поле прискорює іони до швидкості, яка приблизно дорівнює швидкості іонного звуку. В той же час, як і в попередньому варіанті, всередину пилового шару розповсюджується нелінійна хвиля. Відбившись від центру симетрії, вона розповсюджується

вправо - в напрямку границі шару. В просторових розподілах електричного поля добре видно утворення кількох солітонів, що рухаються один за одним. Досягши границі, передній солітон хвилі взаємодіє з подвійним шаром і практично зупиняється. Через деякий час зупиняються і наступні за ним солітони. В областях знаходження солітонів утворюються також піки в розподілах концентрації та швидкості іонів. Причому, з часом концентрація іонів в цих максимумах наростає необмежено, що приводить до нестійкості схеми розрахунку. Зменшення кроку по координаті та часу не дозволяє подолати цю нестійкість. Це дає змогу стверджувати, що в досліджуваному режимі утворюються розривні розв'язки, викликані ефектом "бунчіровки" іонів [11]. Відзначимо, що можливість подібного ефекту при еволюції нелінійних ленгмюрівських хвиль була показана також в [12]. Фізично розривні розв'язки в нашій моделі означають наявність багатьох потоків і неможливість використання гідродинамічного наближення в області розриву. Введення в рівняння штучної в'язкості, яка суттєва лише в областях з великими градієнтами параметрів (тобто в областях піків), приводить до обмеження наростання концентрації іонів. В результаті, ми змогли одержати стаціонарні розподіли параметрів плазми в області пилового шару ($0 < \xi < 30$).

Висновки

Одержані в роботі результати показують, що при взаємодії плазми з обмеженим шаром пилових частинок можуть бути реалізовані різні стаціонарні розподіли параметрів плазми. У випадку, коли осадження частинок плазми на пилинках є незначним, розподіли концентрацій іонів та електронів монотонні, а напруженість самоузгодженого електричного поля в плазмі незначна. Збільшення концентрації або розміру пилових частинок приводить до зростання електронних та іонних потоків на пилові частини. В результаті, на границі пилового згустку утворюються нелінійні шари просторового заряду, які викликають ефект "бунчіровки" при еволюції нелінійної хвилі і утворення нелінійних дисипативних структур. Одержані розподіли електричного поля можуть бути використані для пояснення причин утворення кристалічної структури в пилових згустках, а також утворення пасток для пилових частинок.

Література

1. Горькавый Н.Н., Фридман А.М. Физика планетных колец. - М: Наука, 1994.
2. U. de Angelis // Physica Scripta. - 1992. - 45. - p.465- 474.
3. Selwyn G.S. //Plasma Sources Sci. Technol. -1994 - 3. -p.340-347.
4. Tomas H., Morfill G. At al. //Phys. Rev. Lett. -1994. -73. -p.652- 655.

5. Bharuthram R., Rao N.N. Self-similar expansion of a warm dusty plasma //Planet Space Sci. -1995. —43. — p.1079-1085.
6. Bharuthram R., Rao N.N., Pillay S.R. Self-Similar Expansion of a Nonideal Dusty Plasma //IEEE Transaction on Plasma Science. — 2001. —29. —p.164-173.
7. Barnes M.S., Keller J.H., Forster J.S., O'Neill, Coultas D.K. //Phys. Rev. Lett. -1992.- 68. - p.313- 316.
8. Yu M.Y., Luo H. //Phys.Plasmas. -1995.- 2. -p.591-593.
9. Bcharuthram R., Rao N.N. //Planet. Space Sci. -1995.-43.-p.1079-1085.
- 10.Поттер Д. Вычислительные методы в физике. -М: Мир, 1975.
- 11.Sack Ch., Shamel H. //Physics Reports. -1987. -- 156. -p.312-395.
- 12.Devidson R.S. Metods in Nonlinear Plasma Theory, - New York: Academic Press, 1972.

Надійшла до редакції 25.12.2005

УДК 620.18:546.28

Микола Г. Находкін,
Микола П. Куліш,
Тетяна В. Родіонова¹

**Вплив відпалювання на
двійникові границі в рівно-
осьових полікремнієвих плівках**

Проведено порівняльний аналіз процесів двійникування в зернах легованих фосфором рівноосьових плівок полікремнію та двійникових орієнтацій ($\Sigma 3$, $\Sigma 9$, $\Sigma 27$) між зернами при відпалюванні в інтервалі температур 1040 – 1200°C. Розглянуто вплив розщеплення міжзеренних границь та множинного двійникування на характеристики двійникових границь при різних температурах відпалювання.

Ключові слова: полікремнієві плівки, структура, двійникування, просвічуюча електронна мікроскопія.

Nikolay G. Nakhodkin,
Nikolay P. Kulish,
Tatyana V. Rodionova¹

**The influence of the annealing on
twin boundaries in equiaxed
polysilicon films**

The comparison analysis of the twinning process occurring within grains of phosphorus-doped polysilicon films and the twin orientations ($\Sigma 3$, $\Sigma 9$, $\Sigma 27$) between grains under annealing in the temperature range 1040 – 1200°C has been carried out. The influence of the splitting of low-angle grain boundaries and multiple twinning on characteristics of twin boundaries at different annealing temperatures has been considered.

Key Words: polysilicon films; structure, twinning, transmission electron microscopy

¹ E-mail: rodtv@univ.kiev.ua

Вступ

Завдяки широкому застосуванню полікремнієвих плівок в мікроелектроніці існує велика кількість досліджень, що присвячені вивченню структури даних плівок. Відомо, що саме структура визначає важливі з точки зору практичних застосувань властивості плівок [1]. Проте дослідження полікристалічних плівок переважно обмежуються аналізом розмірів зерен. Між тим відомо [1,2], що суттєвий вплив на властивості цих плівок, особливо при переході до нанокристалічних шарів, мають дефекти. Для кремнію, як для всіх матеріалів зі структурою алмазу, одними з найбільш характерних планарних дефектів є двійники. Схильність даних матеріалів до двійникування визначається порівняно малим розходженням між енергією нормальної та двійникової конфігурацій [3]. Двійникування, особливо при наявності двійникових границь високого порядку, може впливати на структурно-чутливі електричні властивості, наприклад, час життя неосновних носіїв заряду, їх рухливість, тощо [1-3]. У зв'язку з цим, становить інтерес дослідження

процесів двійникування в полікремнієвих плівках в залежності від умов їх одержання плівок і подальшої технологічної обробки.

Аналіз особливостей структури полікремнієвих плівок з рівноосьовою структурою показав що двійникові границі в таких плівках можна розділити на два типи: 1 – двійникові границі всередині зерен, що виникають внаслідок розщеплення границь зерен [4]; 2 – двійникові розорієнтації між зернами, що формуються в результаті конкурентного росту зерен при відпалюванні [5,6]. Обидві групи границь роблять внесок у формування стабільної структури полікремнієвих плівок.

В даній роботі на основі досліджень методом просвічуючої електронної мікроскопії проведено порівняльний аналіз розвитку процесів двійникування в зернах та двійникових орієнтацій між зернами в легованих фосфором полікремнієвих плівках з рівноосьовою структурою при відпалюванні.

Методика

Полікремнієві плівки отримували методом хімічного осадження з газової фази в реакторі зниженого тиску на підкладки монокристалічного кремнію з шаром окислу SiO_2 товщиною $\sim 0,1$ мкм. Товщина плівок $0,5$ мкм. Температура осадження 630°C . Плівки легували фосфором шляхом термодифузії. Рівень легування -10^{21} см^{-3} . Зразки відпалювали в атмосфері N_2 в інтервалі температур $1040-1200^\circ\text{C}$ на протязі 30 хвилин.

Для електронно-мікроскопічних досліджень на проходження товщину зразків зменшували в площині підкладки шляхом хімічного травлення в суміші $\text{HF}:\text{HNO}_3$ (1: 5). Орієнтаційні співвідношення між ділянками, а також відповідні кристалографічні напрямки встановлювали з електроннограм. Окрім того, взаємну розорієнтацію суміжних зерен визначали з електронно-мікроскопічних знімків шляхом вимірювання кутів між слідами $\langle 112 \rangle$ мікродвійників, які присутні в більшості зерен.

Результати й обговорення

Електронно-мікроскопічні дослідження показали, що невідпалені полікремнієві плівки характеризуються однорідною структурою з середнім розміром зерен $0,1$ мкм (рис.1,а). Зерна мають складну форму, їх границі криволінійні, а кути в стиках зерен далекі від значення 120° . Двійники в зернах практично не спостерігаються, що не дає можливості визначити їх взаємну розорієнтацію та побудувати для невідпалених плівок спектр низькоенергетичних границь.

В процесі відпалювання при температурах $1040-1200^\circ\text{C}$ в плівках спостерігається збільшення розмірів зерен, що супроводжується перебудовою складної системи міжзеренних границь. У багатьох зернах

присутні двійникові прошарки (рис. 1,б) переважно пластинчатої форми. Це природно для кремнію, оскільки він відноситься до матеріалів з малим значенням енергії дефектів пакування, для яких, як свідчить аналіз на основі дислокаційного механізму розщеплення границь зерен [7], характерним є формування пластинчатих двійників. Кутові двійники спостерігаються рідко. Частина двійникових прошарків розповсюджуються через усе зерно від границі до границі, але багато є й таких, що обриваються всередині зерен і при зростанні тривалості відпалювання можуть зникати (мігрувати до міжзеренної границі).

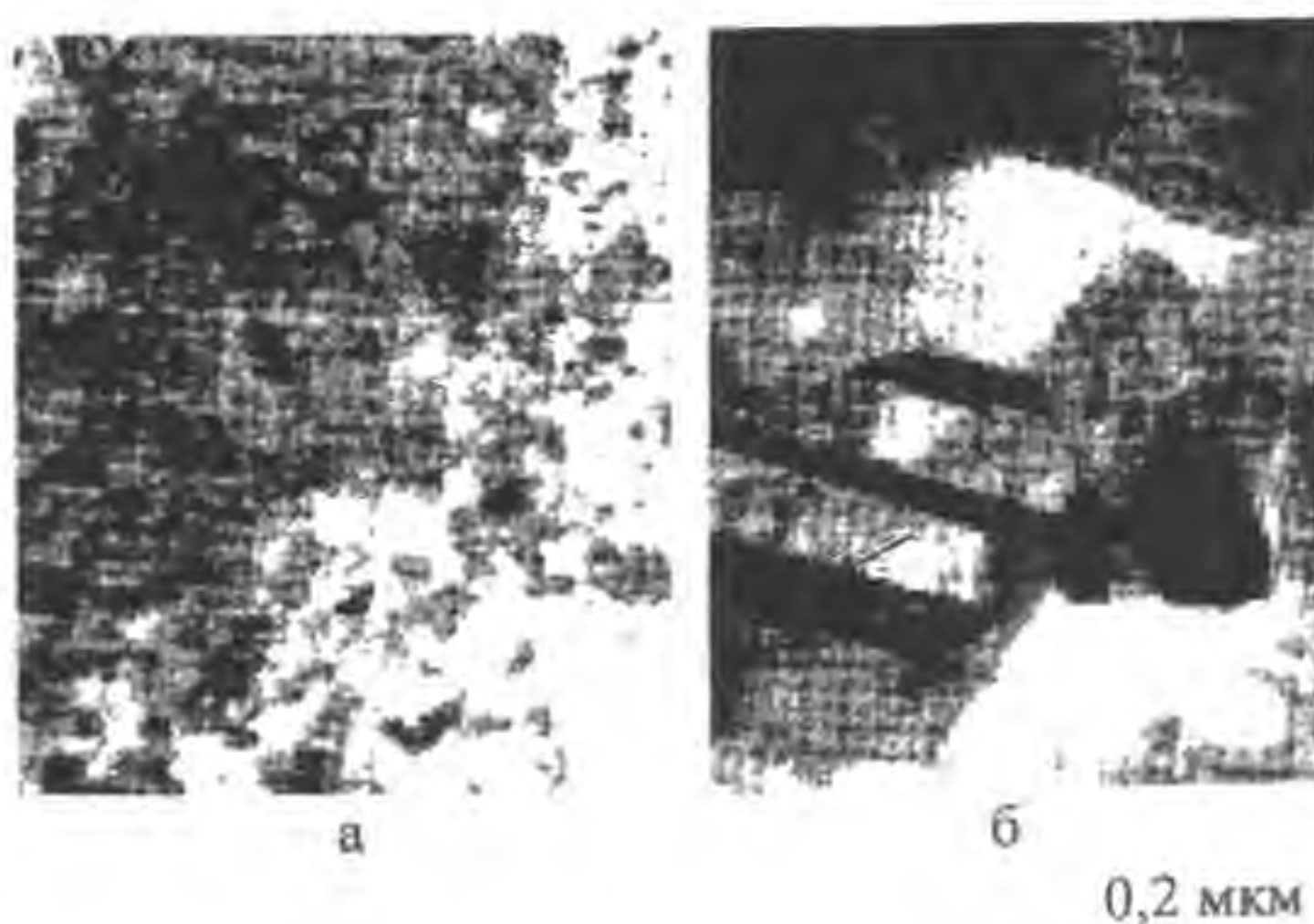


Рис.1 Електронно-мікроскопічне зображення легованих фосфором полікремнієвих плівок до (а) та після (б) відпалювання при температурі 1150°C на протязі 30 хвилин (стрілками помічені двійникові прошарки в зерні).

Для кількісної характеристики двійникових границь в зернах рівноосьових полікремнієвих плівок у залежності від температури відпалювання використовували такі параметри [4]: l - довжина двійникових границь на одиницю площі рекристалізованого зерна (питома довжина двійникових границь); N - густина двійників відпалювання в рекристалізованих зернах. Для розрахунку даних параметрів застосовувались наступні вирази [6]:

$$l = \frac{\sum l_i}{\sum S_k}, \quad (1)$$

де l_i - довжина двійникової границі; S_k - площа рекристалізованого зерна;

$$N = \frac{\sum_i N_i}{\sum_k S_k}, \quad (2)$$

де $\sum_i N_i$ - сумарна кількість двійникових границь: $i = 1, \dots, n$; $k = 1, \dots, m$; n, m - відповідно загальна кількість двійникових границь і рекристалізованих зерен в досліджуваній площі підліфа.

Розраховані за виразами (1) - (2) характеристики двійникування наведені в Таблиці 1. Аналіз показав, що при постійному часі відпалювання (30 хв.) зростання температури відпалювання від 1040°C до 1200°C супроводжується зменшенням величин I та N .

Виявлені закономірності обумовлені відпалом двійників в крупних зернах в процесі рекристалізації плівок. Такі структурні перетворення ведуть до зниження енергії системи при відпалюванні внаслідок релаксації внутрішніх порушень, обумовлених наявністю дефектів.

Таблиця 1. Кількісні характеристики розвитку двійникування в зернах полікристалічних плівок кремнію в залежності від температури відпалювання

$T_{\text{відп.}}$ $^\circ\text{C}$	$t_{\text{відп.}}$ год.	I , мкм^{-1}	N , мкм^{-2}
1040	0,5	6,82	20,38
1120	0,5	5,51	14,90
1150	0,5	2,65	8,09
1200	0,5	2,53	6,27

Кількість двійникових розорієнтацій між зернами в рівноосьових полікремнієвих плівках для різних температур відпалювання була проаналізована на основі експериментально отриманих в роботі [5] розподілів зерен по кутах розорієнтації. В Таблиці 2 наведено відносну кількість границь різного типу у полікремнієвих плівках в залежності від температури відпалювання. Видно, що відносна частка двійникових границь $\Sigma=3$ та $\Sigma=9$, що відповідають двійникам першого та другого порядків, найбільша при температурі відпалювання 1040°C і зменшується при зростанні температури до 1200°C .

Велику кількість двійникових границь в плівках, що відпалені при температурах 1040 - 1120°C , можна пояснити розщепленням в процесі відпалювання малокутових границь. Такі границі в великій кількості спостерігаються в даних плівках внаслідок того, що ріст зерен в них

відбувається шляхом коалесценції [10]. Як відомо [7], розщеплення малокутових границь може здійснюватись з утворенням границь $\Sigma=3$. Порівняння даних Таблиці 1 та Таблиці 2 вказує, що при цих же температурах відпалювання спостерігаються найбільші значення питомої довжини двійникових границь (l) та найбільша густина двійників відпалювання (N). Ця обставина дозволяє припустити, що в кремнії, як і в металах [7], розщеплення границь зерен супроводжується виникненням та ростом двійників відпалювання в зернах.

Таблиця 2 Відносна кількість різних границь зерен у полікремнієвих плівках у залежності від температури відпалювання, %

Температура відпалювання (°C)	Границі зерен				
	Загального типу	$\Sigma=3$	$\Sigma=9$	$\Sigma=27$	Інші спеціальні границі
1040	42,9	21,4	7,1	14,3	14,3
1120	57,2	21,4	14,3	-	7,1
1150	36,1	30,64	13,9	11,1	8,3
1200	40	13,3	6,7	20	20

Як видно з Таблиці 1, при температурі відпалювання 1200°C кількість двійників в плівках зменшується. Тобто відбувається процес відпалювання дефектів в процесі рекристалізації плівок. Водночас зменшується частка двійникових розорієнтацій зерен $\Sigma=3$ та $\Sigma=9$ (Таблиця 2). Проте кількість границь $\Sigma=27$, що являють собою двійникові границі третього порядку, зростає. Формування таких границь є наслідком множинного двійникування по площинам $\{111\}$, яке має місце в процесі міграції границь $\Sigma=3$ та $\Sigma=9$ при відпалюванні. Як відомо [8], саме міграція границь зерен є рушійною силою росту зерен при цих температурах відпалювання.

Висновки

Порівняльний аналіз розвитку процесів двійникування в зернах та двійникових орієнтацій між зернами в легованих фосфором полікремнієвих плівках з рівноосьовою структурою при відпалюванні показав:

1. Зростання температури відпалювання полікремнієвих плівок з рівноосьовою структурою від 1040°C до 1120°C супроводжується зменшенням питомої довжини двійникових границь та густини двійників в зернах. Також зменшується кількість двійникових границь $\Sigma=3$ та $\Sigma=9$.

2. Наявність великої кількості двійників усередині зерен та значної частки міжзеренних границь $\Sigma=3$ в плівках, відпалених при температурі 1040°C , обумовлено розщепленням мало кутових границь, що утворюються внаслідок росту зерен шляхом коалесценції.
3. При температурі відпалювання 1200°C має місце відпалювання двійників всередині зерен. Водночас за рахунок процесів множинного двійникування при міграції границь зерен зменшується частка границь $\Sigma=3$ та $\Sigma=9$ та зростає кількість границь більш високого порядку двійникування $\Sigma=27$.

Робота виконана при частковому фінансуванні Міністерства освіти та науки України (грант М/240-2004).

Література

1. Rath J.K. Low temperature polycrystalline silicon: a review on deposition, physical properties and solar cell applications // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2003. V. 76, № 4. P. 431-487.
2. Андриевский Р.А. Наноматериалы: концепция и современные проблемы // Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И.Менделеева), 2002, Т. XLVI, №5. С. 50-56.
3. Дефекты в кристаллах полупроводников. М.: Мир, 1969. 376 с.
4. Находкин, Н.П. Кулиш, Т.В. Родионова Двойникование в поликремниевых пленках с равноосной структурой при отжиге //Сборник докладов 12-го Международного симпозиума "Тонкие пленки в электронике" "Алмазные пленки и пленки родственных материалов", Харьков. 2001. С. 305-307.
5. Находкін М.Г., Родіонова Т.В., Городецький О.С. Еволюція зернограничної структури в легованих фосфором полікремнієвих плівках при відпалюванні // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: фіз.-мат. науки. Вип. 2. 2003. С.290-294.
6. Находкин Н.Г., Кулиш Н.П., Родионова Т.В. Границы зерен в поликристаллических пленках // Алмазные пленки и пленки родственных материалов. Сборник докладов 15-го Международного симпозиума "Тонкие пленки в оптике и электронике". - Харьков: ННЦ ХФТИ, "Константа" 2003. С. 288-290
7. Копецкий Ч.В., Орлов А.Н., Фионова Л. К. Границы зерен в чистых материалах. - М.: Наука, 1987. - 158 с.
8. Nakhodkin N.G., Rodionova T.V. Formation of different types of polysilicon film structures and their grain growth under annealing// Phys. Stat. Sol.(a). 1991. V. 123, № 2. P. 431-439.

Надійшла до редколегії 12.10 05 р.

УДК 621.385.833

Микола Г. Находкін
Микола І. Федорченко¹

Електронна структура інтерфейсів Cu/Ge(111).

За допомогою методів електронної спектроскопії досліджено формування Cu/Ge інтерфейсів при адсорбції Cu на кристалічних та розупорядкованих бомбардуванням іонами Ar^+ поверхнях Ge(111) при кімнатній температурі. Установлено, що на розупорядкованих поверхнях Ge(111) має місце збагачення об'ємної частини інтерфейсу Cu/Ge атомами Cu. Формування електронної структури характерної для 3d зони об'ємного шару Cu відбувається при значно більших ступенях покриття міді, ніж на кристалічних Ge(111)-2x8 поверхнях.

Ключові слова: інтерфейс Cu/Ge(111)-2x8, розупорядкована поверхня Ge(111), 3d зона Cu.

¹ E-mail: mif@univ.kiev.ua

Вступ

Адсорбція атомів Cu на поверхнях напівпровідників є предметом значної кількості досліджень [1], які зумовлені її практичним використанням для виготовлення міжелементних з'єднань та контактів із силіцидів та германідів до напівпровідникових плівок в інтегральних схемах. Використання міді в різноманітних технологіях потребує застосування як стопорів, так і стимуляторів її дифузії. Наші попередні дослідження формування інтерфейсу Cu/Si встановили [2], що аморфізація приповерхневої області кристалічного Si іонами Ag збільшує коефіцієнти взаємної дифузії атомів Si та Cu, що призводить до збільшення вагової товщини плівки Cu, необхідної для формування електронної структури валентної зони інтерфейсу, характерної для об'ємної міді. Природа цього явища ще й досі не повністю з'ясована. Невідомо навіть, чи буде спостерігатися подібне явище при адсорбції міді на інших розупорядкованих поверхнях напівпровідників. Формування інтерфейсу Cu на кристалічній поверхні Ge(111)2x8 досліджувалося в роботах [3, 4]. Але адсорбція Cu на розупорядкованих

Mykola G. Nakhodkin
Mykola I. Fedorchenko¹

The Cu-/Ge(111) interface electronic structure.

The formation of Cu/Ge interfaces at Cu adsorption on ordered and disordered by Ar^+ ion bombardment of Ge(111) surfaces was studied by means of the ultraviolet photoelectron spectroscopy. It is shown that interaction of Cu atoms with Ge(111) surfaces leads to interface intermixed region for $\Theta_{Cu} \leq 16ML$ on Ge(111)-2x8 surface and for $\Theta_{Cu} > 32ML$ on a-Ge(111) even when metal deposition occurs at RT. The bulk-like Cu 3d band occurs when $\Theta_{Cu} \leq 16ML$ on Ge(111)-2x8 surface and $\Theta_{Cu} > 32ML$ on a-Ge

Keywords: Ge(111)-2x8 interface, disordered a-Ge(111) surface, Cu 3d band

іонами Ag поверхнях Ge ще не досліджувалась. Тому дослідження адсорбції Cu на розупорядкованих поверхнях Ge із такою ж, як і в Si кристалічною структурою, але з іншими сталими ґратки та властивостями атомів може допомогти в з'ясуванні деталей формування інтерфейсів Cu на цих поверхнях. До того ж із літератури відомо [5], що коефіцієнт дифузії Cu в Ge в 15 – 20 разів більше ніж в Si.

Метою цієї роботи було дослідження початкових стадій формування інтерфейсу Cu на двох типах поверхонь: кристалічних поверхнях Ge(111)2x8 і аморфізованих бомбардуванням іонами Ag поверхнями α -Ge.

Методика експерименту

Дослідження проводились в надвисоковакуумній камері з тиском залишкових газів $\sim 2 \cdot 10^{-10}$ тор, оснащених методиками оже електронної спектроскопії (ОЕС), дифракції повільних електронів (ДПЕ) та ультрафіолетової фотоелектронної спектроскопії (УФЕС) при енергіях квантів 7.7 і 10.2 еВ. У камері містилась іонна гармата для очистки та розупорядкування досліджуваних поверхонь. Зразок очищався за допомогою бомбардування іонами Ar^+ ($E_p = 800$ еВ) та наступного відпалювання при температурі 1000 К до тих пір, поки ДПЕ та ОЕС не зсвідчували про наявність добре впорядкованої та вільної від домішок (на рівні меншому за 0,01 моношарів (МШ)) поверхні Ge(111)-2x8. Напилення Cu здійснювалось за допомогою термічного джерела парів міді. Ступінь покриття германієвих поверхонь міддю (Θ_{Cu}) контролювалась за допомогою спеціально градуйованих кварцових терезів [6]. Значення $\Theta_{Cu} = 1$ відповідало розрахованій густині атомів германію на не перебудованій поверхні Ge(111)1x1 ($7.23 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$). Швидкість напилення Cu становила приблизно 0,2 МШ за хвилину. Температура підкладки при цьому утримувалась близькою до кімнатної.

Результати експериментів та їх інтерпретація

На рис. 1 наведені фотоелектронні спектри (ФЕС) при $h\nu = 10.2$ еВ для інтерфейсів Cu/Ge при декількох значеннях ступенів покриття міддю Θ_{Cu} . Вони відображають динаміку формування електронної структури інтерфейсів у широкому інтервалі значень Θ_{Cu} ($0 < \Theta_{Cu} < 32$ МШ), коли відбуваються зміни від атомарно чистої поверхні Ge(111)-2x8 до умов близьких для об'ємного шару Cu. Так як на осі абсцис відкладається енергія фотоелектронів відносно рівня Фермі або енергія їх зв'язку ($\epsilon = E - E_F$), то коли

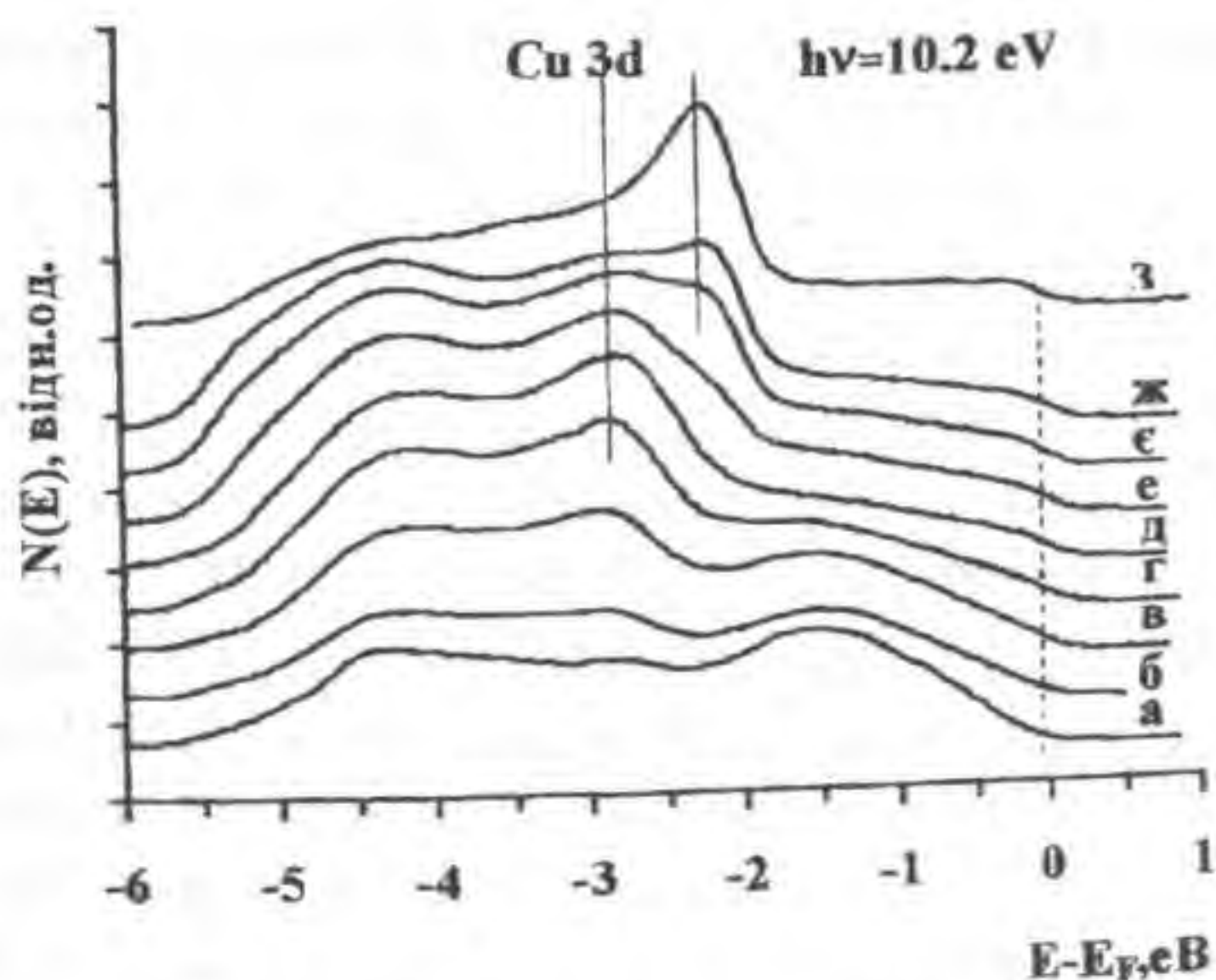


Рисунок 1 – Фотоелектронні спектри (ФЕС) системи Cu/Ge(111)-2x8 при різних Θ_{Cu} : а – $\Theta_{\text{Cu}} = 0$ МЩ, б – 1 МЩ, в – 2 МЩ, г – 4 МЩ, д – 8 МЩ, е – 16 МЩ, є – 24 МЩ, ж – 32 МЩ, з – $\gg 34$ МЩ, об'ємноподібна мідь.

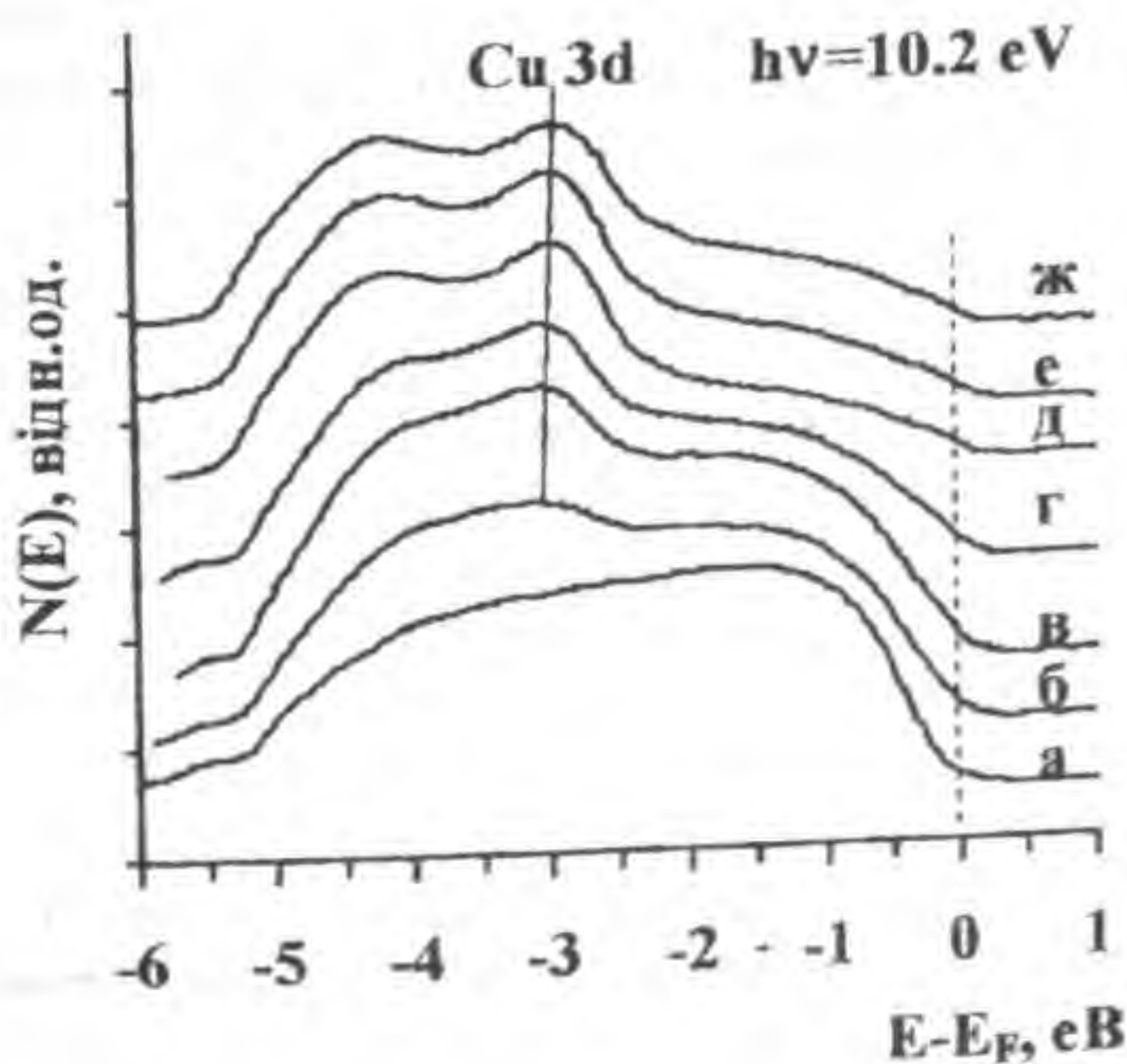


Рисунок 2 – ФЕС системи Cu/a-Ge(111) при різних Θ_{Cu} : а – $\Theta_{\text{Cu}} = 0$ МЩ, б – 1 МЩ, в – 2 МЩ, г – 4 МЩ, д – 8 МЩ, е – 16 МЩ, ж – 24 МЩ.

$\varepsilon < 0$, енергетичний рівень електронів у зразку з енергією $|\varepsilon|$ знаходиться нижче рівня Фермі. Уже при $\Theta_{Cu} = 1$ МШ у ФЕС з'являється пік при енергії $\varepsilon = 2.8$ еВ, яка відрізняється від енергії зв'язку 3d електронів масивної Cu ($\varepsilon_{Cu} = 2.2$ еВ [7]). Пік з енергією $|\varepsilon| \geq 2.8$ еВ ми пропонуємо ідентифікувати як пік 3d електронів Cu у суміші або сполуці Cu і Ge (Cu_xGe_y). Зі зростанням Θ_{Cu} інтенсивність цього піку збільшується, він повільно розширюється в бік менших енергій зв'язку, але його положення залишається майже незмінним ($\varepsilon \approx 2.8$ еВ). Коли ступінь покриття міді стає більшою 16 МШ, то на ФЕС з'являється перегин при $\varepsilon = 2.2$ еВ (рис. 1). Він стає добре помітною особливістю ФЕС, коли $\Theta_{Cu} \approx 24$ МШ, а при $\Theta_{Cu} \approx 32$ МШ перетворюється в чіткий пік ФЕС, локалізований при енергії $\varepsilon = 2.2$ еВ, яка збігається з енергією зв'язку низькоенергетичних 3d електронів масивної міді [6]. Тобто при $\Theta_{Cu} \approx 32$ МШ в електронній структурі інтерфейсу Cu/Ge(111)-2x8 з'являються майже всі особливості 3d зони масивної міді, хоча співвідношення між ними ще відрізняється від його значення для масивного шару Cu. Таким чином, шар міді із властивостями масивної міді на інтерфейсі Cu/Ge(111)-2x8 починає формуватись при $\Theta_{Cu} \geq 16$ МШ, а при менших Θ_{Cu} до складу приповерхневого шару цього інтерфейсу входять суміші або сполуки Cu і Ge (Cu_xGe_y), які дають на ФЕС пік при $|\varepsilon| > 2.2$ еВ.

На рис. 2 наведені ФЕС одержані при $h\nu = 10.2$ еВ від інтерфейсів (Cu/a-Ge(111)), утворених адсорбцією Cu на розупорядкованій іонами Ag поверхні a-Ge(111). Θ_{Cu} змінювалась від 0 до 24 МШ. Як і в попередньому випадку інтерфейсу на кристалічному германію Cu/Ge(111)-2x8, на ФЕС інтерфейсу Cu/a-Ge(111) при $\Theta_{Cu} = 1$ МШ можна також розпізнати пік 3d електронів Cu з енергією зв'язку $\varepsilon \approx 3.1$ еВ. Подальше збільшення Θ_{Cu} збільшує інтенсивність, і змінює його енергетичне положення від 3.1 еВ при $\Theta_{Cu} = 1$ МШ до 2.95 еВ при $\Theta_{Cu} = 24$ МШ, але яке залишається все ще більшим від енергії зв'язку низькоенергетичного піку 3d електронів для масивної Cu ($\varepsilon_{Cu} \approx 2.2$ еВ). Для пояснення цих особливостей ФЕС інтерфейсів Cu/a-Ge(111) можна, як і в попередньому випадку, висловити гіпотезу, що вони пов'язані з утворенням хімічного зв'язку між атомами Cu та Ge (Cu_xGe_y) і відсутністю об'ємної фази Cu у приповерхневій області інтерфейсів при $\Theta_{Cu} \leq 24$ МШ. А ступені покриття, при яких формується шар із властивостями масивної міді на цьому інтерфейсі набагато більші відповідних значень у випадку інтерфейсу на кристалічному германію ($\Theta_{Cu} \geq 16$ МШ) внаслідок більшого коефіцієнту дифузії атомів Cu в об'єм a-Ge.

Для перевірки цієї гіпотези ми скористалися дослідженням ОЕС цих інтерфейсів. ОЕС виявили різну стехіометрію плівок, що утворюються при адсорбції Cu на кристалічній і аморфізованій поверхнях Ge. На рис. 3 наведені відношення інтенсивностей $I_{Cu}(62 \text{ eV})/MVV$ та $I_{Ge}(52 \text{ eV})/MMV$ оже

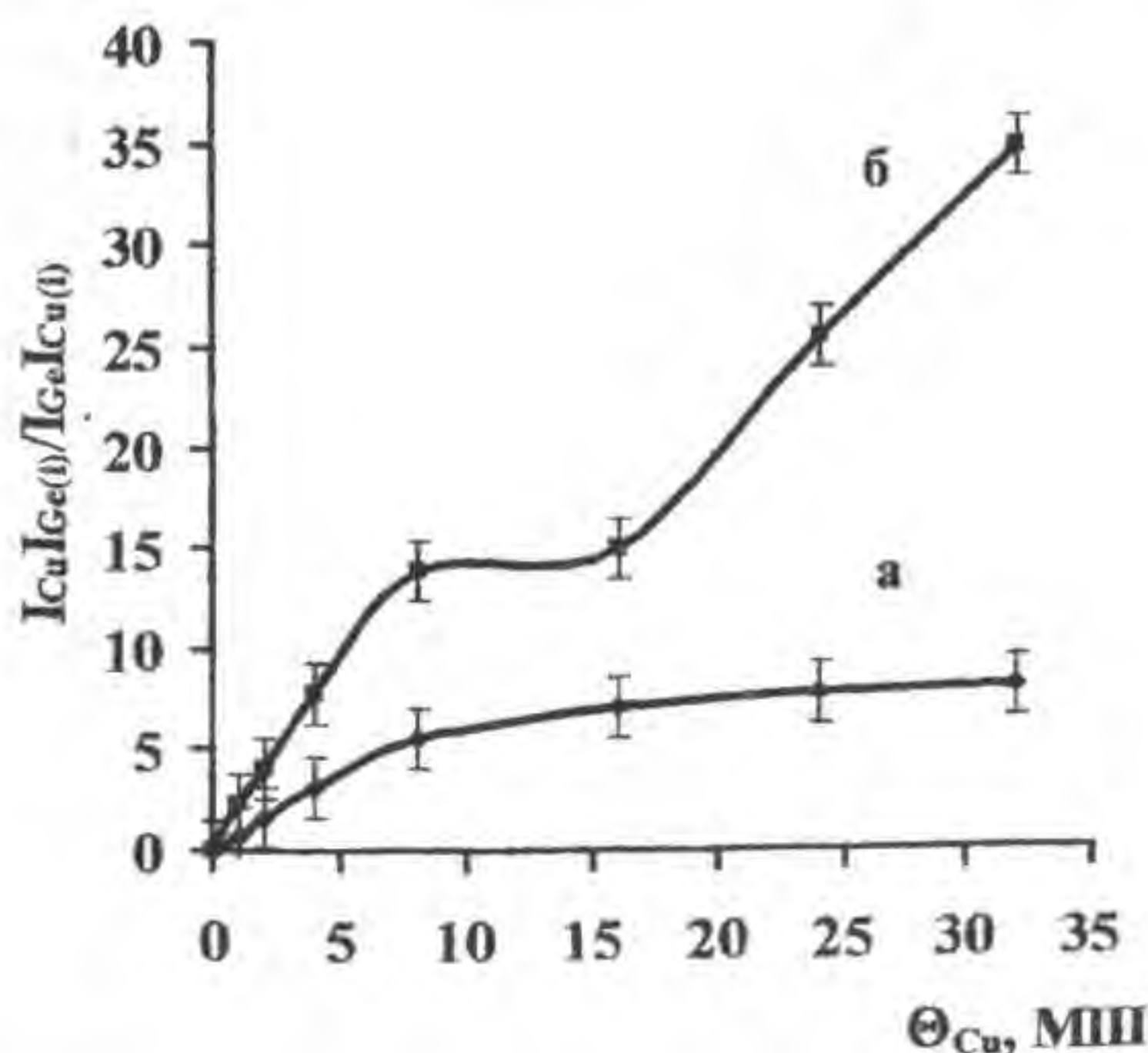


Рисунок 3 – Залежність $I_{Cu} I_{Ge(i)} / I_{Ge} I_{Cu(i)} (\Theta_{Cu})$ – відношення нормованих на значення для чистих об'ємних зразків інтенсивностей MVV оже-лінії Cu та MMV оже-лінії Ge від ступеня покриття Θ_{Cu} на різних підкладках: а – α -Ge(111), б – Ge(111)2x8.

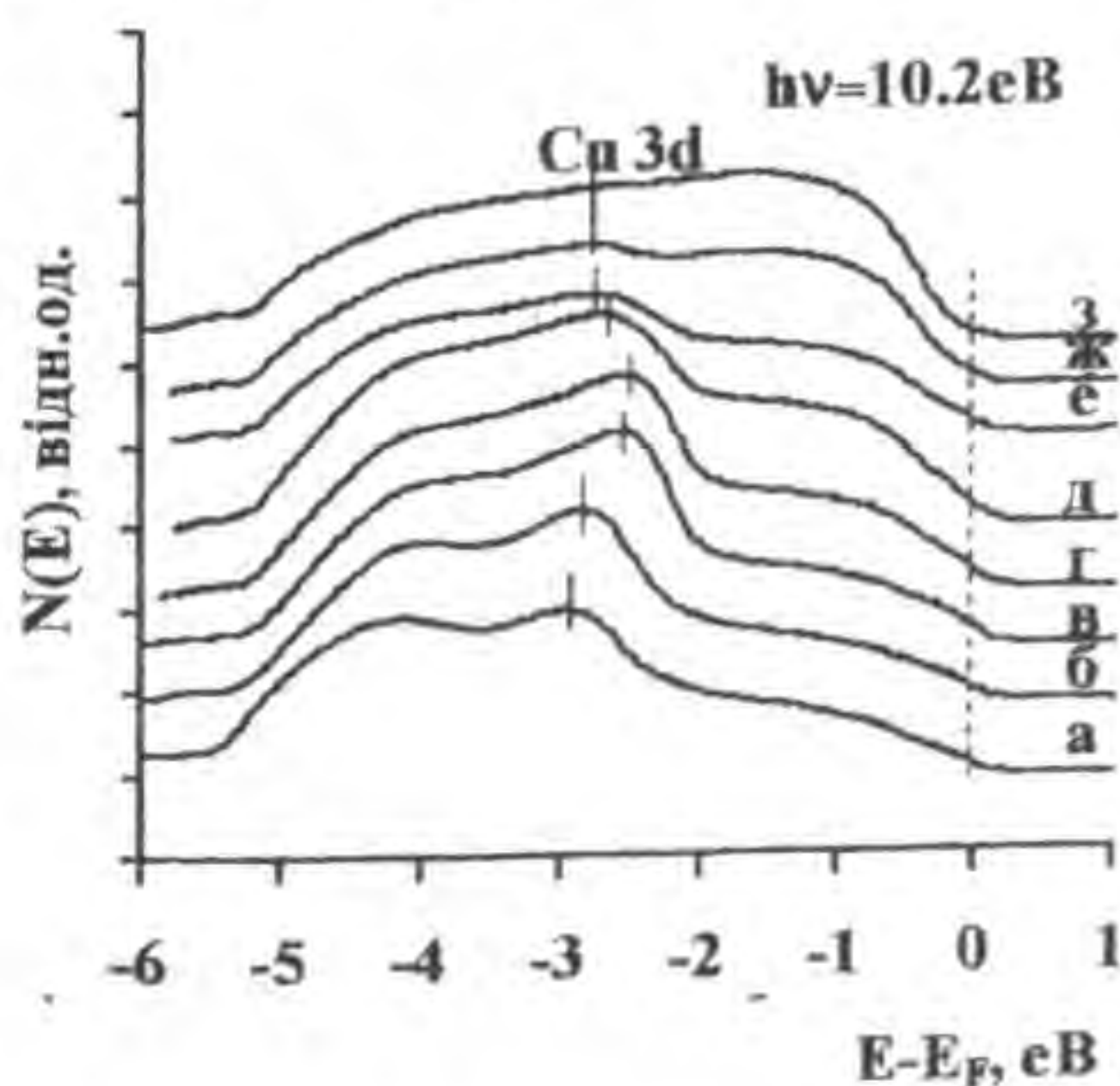


Рисунок 4 – ФЕС системи Cu/ α -Ge(111) ($\Theta_{Cu} = 24$ ML) після іонного травлення з різними дозами (D): а – $D = 0$, б – $D = 1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, в – $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$, г – $2.6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$, д – $4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$, е – $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$, ж – $9 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$, з – $2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$.

– піків Cu та Ge нормованих на їх значення $I_{Cu(i)}$ та $I_{Ge(i)}$ для чистих об'ємних зразків у залежності від Θ_{Cu} для аморфізованої (а) та кристалічної (б) поверхонь Ge(111). Для аморфізованої поверхні a-Ge(111) це відношення монотонно зростає до $\Theta_{Cu} \approx 8$ МШ, після чого при подальшому збільшенні Θ_{Cu} практично не змінюється в діапазоні $8 \leq \Theta_{Cu} \leq 32$ МШ. Для кристалічної поверхні Ge залежність I_{Cu}/I_{Ge} від Θ_{Cu} при початковому збільшенні Θ_{Cu} зростає швидше, ніж для a-Ge. У межах від 8 МШ до 16 МШ відношення I_{Cu}/I_{Ge} майже не залежить від ступені покриття, але починаючи з $\Theta_{Cu} \geq 16$ МШ воно знову зростає. Початок цього росту збігається з появою чіткого ФЕС піку 3d Cu фази чистої міді при $\epsilon \approx 2.2$ eV (рис. 1). Без урахування ефективної дифузії атомів Cu в об'єм Ge можливо було б зробити припущення про більш виражений острівцеподібний характер росту плівок Cu на аморфізованій поверхні a-Ge. При цьому навіть при $\Theta_{Cu} < 2$ МШ на аморфізованій поверхні Ge атоми Cu повинні були збиратись в острівці таких великих розмірів, що їх електронні властивості були б близькими до властивостей об'ємного Cu [7]. Але вигляд ФЕС протирічить цьому припущенню, що може свідчити про утворення хімічних сполук Cu_xGe_y , як на аморфізованих так і на кристалічних поверхнях Ge. Причому співвідношення атомів Cu та Ge в їх сполуках є значно більшим для кристалічних поверхонь Ge. Особливості інтерфейсів Cu/Ge(111) свідчать про більш ефективну дифузію атомів Cu в об'єм аморфізованого іонами Ag германію.

Для перевірки нашої гіпотези про існування на інтерфейсах шару, що складається із Cu і Ge, ми досліджували їх ФЕС та ОЕС після травлення іонами Ag з енергією 800 eV. Іонне травлення інтерфейсу Cu/Ge(111)-2x8, сформованого на кристалічній підкладинці з початковим ступенем покриття $\Theta_{Cu} \geq 24$ МШ, збільшує густини станів 3d електронів з енергією зв'язку $\epsilon \approx 2.2$ eV вже після іонної дози $D=1 \cdot 10^{15}$ см⁻², що свідчить про збільшення фази об'ємоподібного Cu в межах глибини виходу фотоелектронів (при $h\nu = 10.2$ eV – 12 Å [8]). Ці дані узгоджуються з дослідженням ОЕС, які показали, що іонне травлення майже однаково збільшує інтенсивність МММ оже-ліній Cu і Ge так, що їх відношення залишається незмінним ($I_{Cu}/I_{Ge} \approx \text{const}$), а також зменшує кількість можливих небажаних домішок вуглецю на поверхні інтерфейсу. З подальшим збільшенням D ознаки об'ємоподібної фази Cu поступово зменшуються. Таким чином, ці дослідження дозволяють дійти до висновку, що на інтерфейсі Cu/Ge(111)-2x8 при $\Theta_{Cu} \geq 16$ МШ дійсно починає формуватися фаза об'ємоподібної міді.

Іонне травлення інтерфейсу Cu/a-Ge(111) з початковим ступенем покриття $\Theta_{Cu} \geq 24$ МШ виявило інші його властивості. На рис 4 наведені ФЕС інтерфейсів Cu/a-Ge(111) після іонного травлення з різними дозами

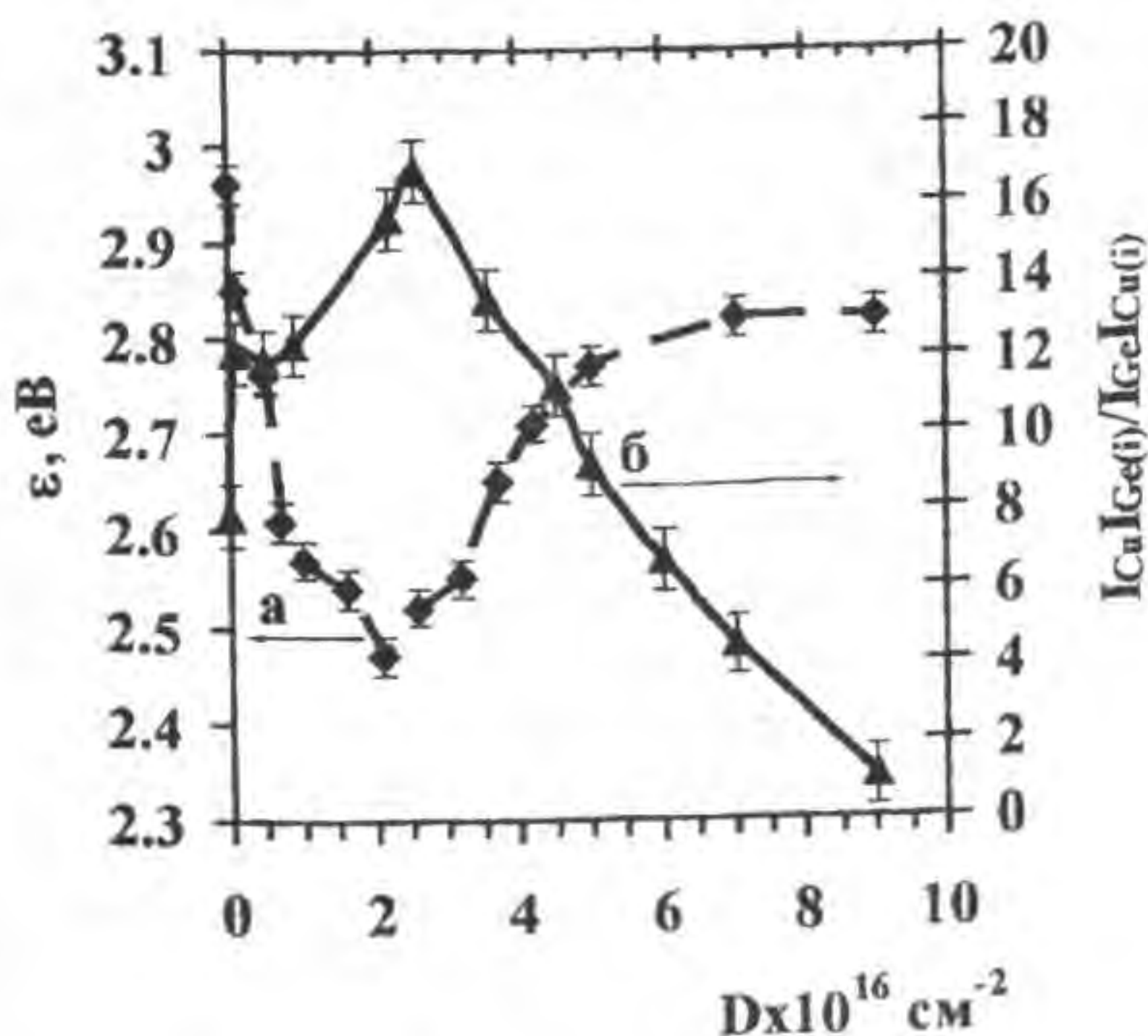


Рисунок 5 – Залежності: а) - $\epsilon(D)$ та б) - $I_{\text{Cu}} I_{\text{Ge}(i)} / I_{\text{Ge}} I_{\text{Cu}(i)} (D)$ для інтерфейсу Cu/a-Ge(111)

D , на яких видно, що низькоенергетичний пік 3d зони Cu змінює своє енергетичного положення (ϵ). Залежність $\epsilon=f(D)$ наведена на рис. 5. Вона проходить через мінімум при іонній дозі $D \approx 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, де набуває значення $\epsilon_{\text{min}} \approx 2.46 \text{ eV}$, яке наближається до значення $\epsilon_{\text{Cu}, \infty}$. Відповідна залежність відношення $I_{\text{Cu}} I_{\text{Ge}(i)} / I_{\text{Ge}} I_{\text{Cu}(i)}$ оже-пиків Cu і Ge від іонної дози зростає й проходить через максимум при $D \approx 2.4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (рис.5.б), значення якої близькі до значень дози у мінімумі залежності $\epsilon(D)$. Все це свідчить про існування в глибині інтерфейсу Cu/a-Ge(111) з початковою ваговою товщиною мідної шівки рівної 24 МШ збагаченого атомами Cu шару. Тобто, в Cu/a-Ge(111) інтерфейсах має місце збагачення його об'єму атомами Cu, як це відомо з літератури для інтерфейсів Au/Si [9,10]. Необхідно відмітити, що згідно з даними роботи [11] при енергії іонів Ar 500 eV коефіцієнт розпорошення атомів Cu становить 2.4, а атомів Ge – 1.1. Це свідчить про те, що насправді збагачення об'єму атомами Cu може бути ще більшим, ніж реєструється в нашому експерименті.

Порівняння ходу формування електронної структури інтерфейсу Cu/Ge(111) з інтерфейсом Cu/Si(100), що досліджувався в нашій попередній роботі [2], дозволило встановити наступне. На поверхні Si(100)-2x1 формування інтерфейсу Cu/Si(100) в основному завершується вже при $\Theta_{\text{Cu}} = 12 \text{ МШ}$, тоді як на поверхні Ge(111)-2x8 електронна структура інтерфей-

су Cu/Ge(111) з ознаками електронної структури об'ємподібної міді формується при більших ступенях покриття, коли $\Theta_{\text{Cu}} \geq 30$ МШ. Це може бути обумовленим більшим коефіцієнтом дифузії Cu в кристалічному Ge в порівнянні з кристалічним Si [3]. В обох інтерфейсах на перших стадіях адсорбції атомів Cu утворюється сполука з атомів адсорбату і підкладки, яка і грає роль стопора дифузії атомів Cu. У випадку інтерфейсу Cu/Ge(111) ефективна товщина германіду Cu, при якій значно зменшується взаємодія між атомами Cu та Ge, є більшою ніж відповідна товщина силіциду Cu, яка значно зменшує взаємодію між атомами Cu та Si.

І навпаки, формування інтерфейсу Cu/a-Ge(111) відбувається при менших Θ_{Cu} , ніж інтерфейсу Cu/a-Si(100). Це може бути обумовлено тим, що коефіцієнт дифузії Cu в a-Si більший, ніж в a-Ge. Різні значення коефіцієнтів дифузії Cu в приповерхневих областях a-Si та a-Ge, аморфізованих бомбардуванням іонами Ag зразків, можуть бути пов'язані з різними значеннями довжин пробігу іонів Ag у Si і Ge відповідно. Чим більше довжина пробігу іонів Ag в досліджуваних матеріалах, тим більше товщина шару розупорядкованого матеріалу, у якому ефективно дифундують атоми Cu і накопичуються там на центрах гетерування у вигляді металевих кластерів [12]. Проведені нами розрахунки з допомогою програми SRIM 2003 [13] показали, що довжина пробігу іонів Ag з енергією 1 кеВ в кремнії становить 34 Å, а в германії- 23 Å. Ці дані корелюють із нашим припущенням. На жаль, у роботі [2] не проводився пошаровий аналіз інтерфейсу Cu/a-Si(100) і там не було встановлено факту збагачення об'ємної області інтерфейсу атомами Cu. Хоча, не виключено, що факт збагачення атомами Cu об'єму є спільним для інтерфейсів Cu/a-Ge(111) та Cu/a-Si(100).

Висновки

На початковому етапі адсорбції міді на кристалічній поверхні Ge(111)-2x8 ($\Theta_{\text{Cu}} < 16$ МШ) у приповерхневому шарі підкладки утворюється прошарок германіду Cu_xGe_y з енергією зв'язку електронів 3d зони Cu рівною $\epsilon \approx 2.8$ еВ. При $\Theta_{\text{Cu}} > 16$ МШ у приповерхневій області інтерфейсу починають утворюватися кластери атомів Cu з електронною структурою характерною для об'ємної міді.

Уперше встановлено, що адсорбовані атоми міді на аморфізованій іонами Ag поверхні Ge(111) дифундують в об'єм і накопичуються там у вигляді кластерів, які мають властивості, що наближаються до характеристик об'ємної міді. Утворюється інтерфейс Cu/a-Ge(111), в якому приповерхнева область збагачена атомами Ge, а об'ємна – атомами Cu.

Встановлено, що електронні структури Cu/Ge та Cu/Si інтерфейсів формуються по-різному. На кристалічних поверхнях інтерфейс Cu/Si фор-

мується при значно меншій ступені покриття Θ_{Cu} , ніж інтерфейс Cu/Ge, а на аморфізованих – інтерфейс Cu/a-Ge(111).

Робота виконувалась за бюджетного фінансування, проект 01БФ052-02 та часткового фінансування Міносвіти та науки України, грант М/240-2004.

Література

1. C. Calandra, O. Bisi, G. Ottaviani, Electron properties of silicon transition metal interface compound, Surf. Sci. Reports, **41** (1985), 271-364.
2. Мельник П. В., Находкін М.Г., Федорченко М.І. Вплив іонного бомбардування на формування Cu/Si(111) інтерфейсів // Вісник київського університету, Серія Фіз.-мат. наук, № 4, - 2000 р., - с.360 – 365.
3. Suzuki T., Omori S., Nihei Y. X-ray photoelectron diffraction study of discommensurate Cu / Ge(111) // Surf. Sci. - 440, L881-886, - 1999.
4. S.Omori, A.Narimatsu, T.Suzuki, Y.Nihei. Photoelectron diffraction study of the initial-stage growth of Cu on Ge(111)-c(2x8) // Surf. Rev. Lett **6**, 1079 – 1083, - 1999.
5. Болтакс Б.И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках // Ленинград, «Наука», - 1972 г. – с. 118- 156.
6. Штекельмахер В. Методы контролируемого нанесения тонких пленок. В книге под редакцией Л. Холленда Пленочная микроэлектроника Москва «МИР» 1968 С.258-330.
7. D.E.Eastman and J.K.Cashion/ Photoemission from Cu, and Au in the 10- to 27 – eV energy range // Phys.Rev.Lett. – v. 24. – 310-313. – 1970
8. Wagner L.F. and Spicer W.E. Observation of a band of silicon surface states containing one electron per surface atom // Phys.Rew.Lett. V.28, P1381-1384, 1972
9. G.Le Lay Physics and electronics of the noble-metal/elemental-semiconductor interface formation: a status report, Surface Science, 1983.-V.132, P.169-204.
10. Находкін М.Г., Федорченко М.І. Дослідження адсорбції Au на поверхні Si(100) з різним ступенем розупорядкування //Металлофізика и новейшие технологии.-2004.-Т.26, №12. -С.1639-1643
11. T.E.Seidel, R.I.Meek, A.G.Cullis Direct comparision of ion-damage gettering of Au in Si // J.Appl.Phys.-1975.-V.46, N2.-P.600-609
12. Г. Венер Распыление ионами и анализ поверхности. В книге под редакцией А. Зандерны “Методы анализа поверхностей”, М. Мир, 1979, С.24
13. J. F. Ziegler SRIM 2003 SRIM.com

Надійшла до редколегії 20.11.2005р.

УДК 53.082.5; 681.7.08

Дмитро В. Поданчук,
Володимир П. Данько,
Михайло М. Котов,
Наталія С. Сутягіна

Ітераційний метод розширення вимірювального діапазону сенсора хвильового фронту Шека-Хартмана

Запропоновано використання у сенсорі хвильового фронту Шека-Хартмана ітераційного алгоритму реєстрації голографічної матриці мікролінз, при виготовленні якої опорний пучок для запису голограми формується самою досліджуваною хвилею. Розглянуто застосування цього методу для розширення кутового динамічного діапазону сенсора.

Ключові слова: сенсор хвильового фронту, голографічна матриця мікролінз, гартманограма.

Dmytro V. Podanchuk,
Volodymyr P. Dan'ko,
Myhailo M. Kotov,
Natalya S. Sutyagina

Iterative expansion of the measurement range of the Shack- Hartmann wavefront sensor

The algorithm of iterative recording of the holographic lenslet array in Shack-Hartmann wavefront sensor is proposed while the reference beam for the hologram recording is formed by the tested wave itself. The application of this technique for angular dynamic range expansion of the sensor is considered.

Key words: wavefront sensor, holographic lenslet array, hartmannogram.

Задача визначення форми хвильового фронту постає у багатьох галузях сучасної прикладної оптики. Вона найчастіше вирішується за допомогою сенсора Шека-Хартмана, який відноситься до класу приладів, що вимірюють локальні нахили хвильового фронту та визначають фазу оптичної хвилі за дискретним набором значень її першої похідної [1].

Роботу сенсора Шека-Хартмана можна розглядати виходячи з принципів геометричної оптики. Досліджуваний хвильовий фронт спрямовується на матрицю мікролінз, що формує у фокальній площині гартманограму, зображення якої фіксується ПЗЗ-фотодетектором. Зміщення точок гартманограми відносно відповідних оптичних осей мікролінз є пропорційними до усередненого по кожній субапертурі локального нахилу хвильового фронту. Матриця локальних нахилів перетворюється у набір коефіцієнтів при поліномах Церніке, що описують аберації хвильового фронту та дозволяють відновити його форму [2].

Значною перешкодою у застосуванні сенсорів Шека-Хартмана є протиріччя між їх чутливістю та кутовим динамічним діапазоном. Для вимірювання хвильових фронтів зі значною кривизною необхідно зменшувати фокусну відстань матриці мікролінз, що приводить до відповідного зменшення кутової чутливості сенсора. Одним із шляхів

вирішення цієї проблеми є застосування голографічної матриці мікролінз, оптична пам'ять якої може бути використана для розширення функціональних можливостей сенсора [3, 4]. Завдяки цьому з'являється можливість виготовлення голографічної матриці з кількома різними просторово рознесеними фокусними відстанями, що дозволяє значно розширити вимірювальний діапазон сенсора при збереженні його кутової чутливості [5, 6]. В даній роботі запропоновано інший метод, що базується на ітераційному алгоритмі запису голографічної матриці мікролінз у процесі проведення вимірювань.

У класичному сенсорі Шека-Хартмана з рефракційною матрицею мікролінз оцінка форми досліджуваного хвильового фронту проводиться, фактично, за ступенем його відмінності від плоскої хвилі. Принциповою особливістю сенсора з голографічною матрицею мікролінз є те, що досліджуваний хвильовий фронт може порівнюватися з хвильовим фронтом довільної форми, який попередньо був записаний у голографічну пам'ять матриці. На цій основі можна побудувати ітераційний алгоритм роботи сенсора з голографічною матрицею мікролінз для дослідження хвильових фронтів, які змінюються у часі. На першому етапі визначається початкова форма хвильового фронту, для цього використовується голографічна матриця мікролінз, що була записана за допомогою опорної плоскої хвилі або хвилі з наперед відомими абераціями. Сенсор фіксуватиме відхилення досліджуваного хвильового фронту від початкового стану. При досягненні межі вимірювального діапазону, який визначається параметрами даної матриці, записується наступна матриця, для якої у якості опорної використовується вже сама досліджувана хвиля. Тепер сенсор буде фіксувати відхилення досліджуваного хвильового фронту від фронту, «зашитого» у пам'яті матриці. По досягненню нової межі записується наступна матриця і так далі. Таким чином, на кожному етапі у якості опорної використовується хвиля, аберації якої є граничними для сенсора з попередньою матрицею мікролінз.

Послідовно додаючи локальні нахили, визначені для кожної субапертури на різних кроках ітераційного процесу, можна визначити всю динаміку зміни форми досліджуваного хвильового фронту. При цьому величина кута максимального локального нахилу, що може бути виміряний для n ітерацій, визначається як:

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_{\max n} = \frac{\partial\Phi_{ref1}}{\partial x} + \sum_{m=1}^n \frac{\Delta x_{\max m}}{f},$$

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial y}\right)_{\max n} = \frac{\partial\Phi_{ref1}}{\partial y} + \sum_{m=1}^n \frac{\Delta y_{\max m}}{f}$$

де Φ – фаза досліджуваного хвильового фронту, Φ_{ref1} – фаза опорного хвильового фронту при першій ітерації, $\Delta x_{\max n}$, $\Delta y_{\max n}$ – максимальне

зміщення сфокусованої точки, що фіксується сенсором, f – фокусна відстань матриці мікролінз. Таким чином, стає можливим вимірювати більші локальні нахили хвильового фронту, ніж це було можливо за допомогою звичайної матриці мікролінз. Оскільки кутова чутливість при цьому не змінюється, то результуючий кутовий динамічний діапазон сенсора зростає. Очевидно, що ступінь розширення діапазону залежить від кількості ітерацій.

Для експериментальної перевірки ітераційного методу розширення вимірювального діапазону сенсора була сконструйована лабораторна установка, оптичну схему якої наведено на рис. 1.

Колімований лазерний пучок за допомогою напівпрозорого дзеркала НПД1 розділяється на дві частини. Частина пучка (верхнє за схемою плече) формує об'єктну хвилю для запису голографічної матриці мікролінз. Пучок проходить крізь еталонну рефракційну матрицю мікролінз РММ і за допомогою системи переносу Л4 – Л5 та дзеркала Д3 та НПД3 спрямовується на голографічну платівку під кутом $\sim 10^\circ$ (на схемі це не відображено). Діаметр мікролінз рефракційної матриці складає 0.4 мм, фокусна відстань 24 мм.

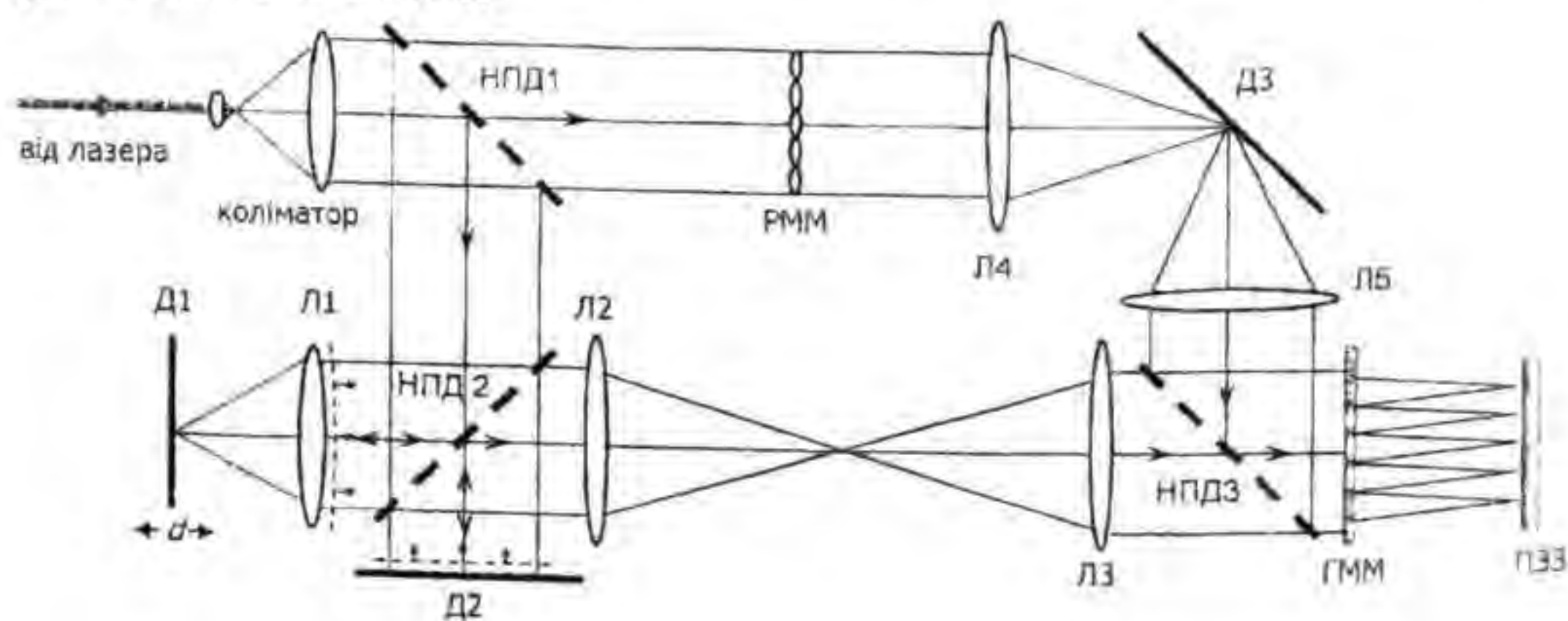
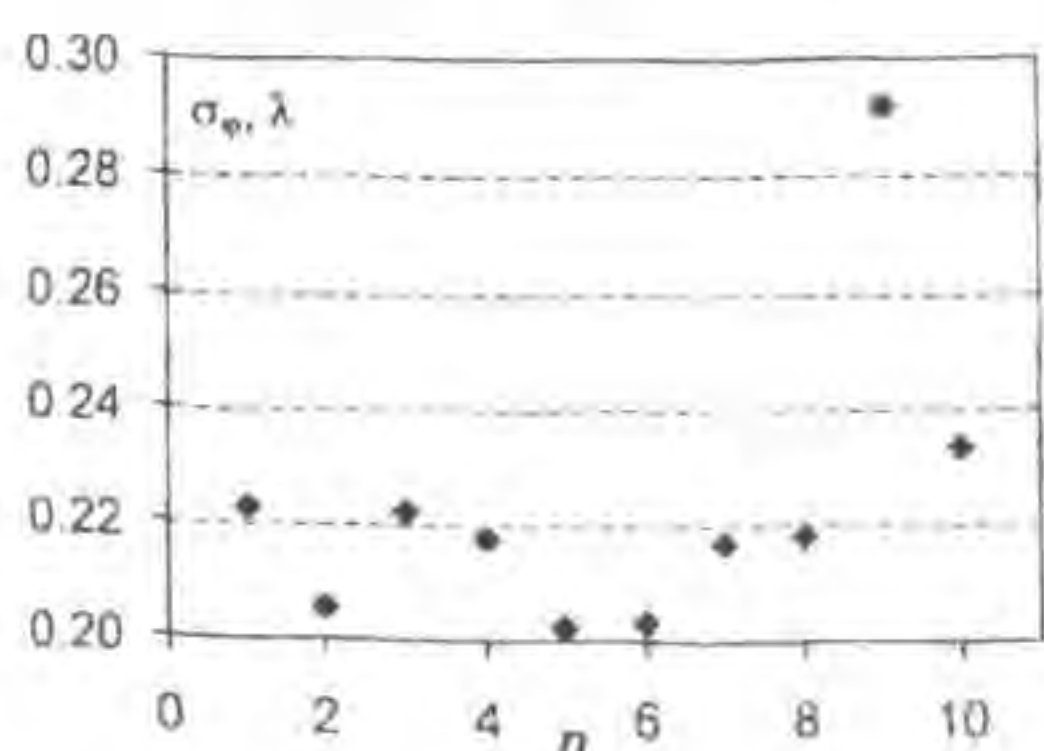


Рис. 1. Оптична схема сенсора: РММ, ГММ – рефракційна та голографічна матриці мікролінз, НПД1–НПД3 – напівпрозорі дзеркала, Д1–Д3 – 100% дзеркала, Л1–Л5 – об'єктиви, ПЗЗ – ПЗЗ-фотодетектор.

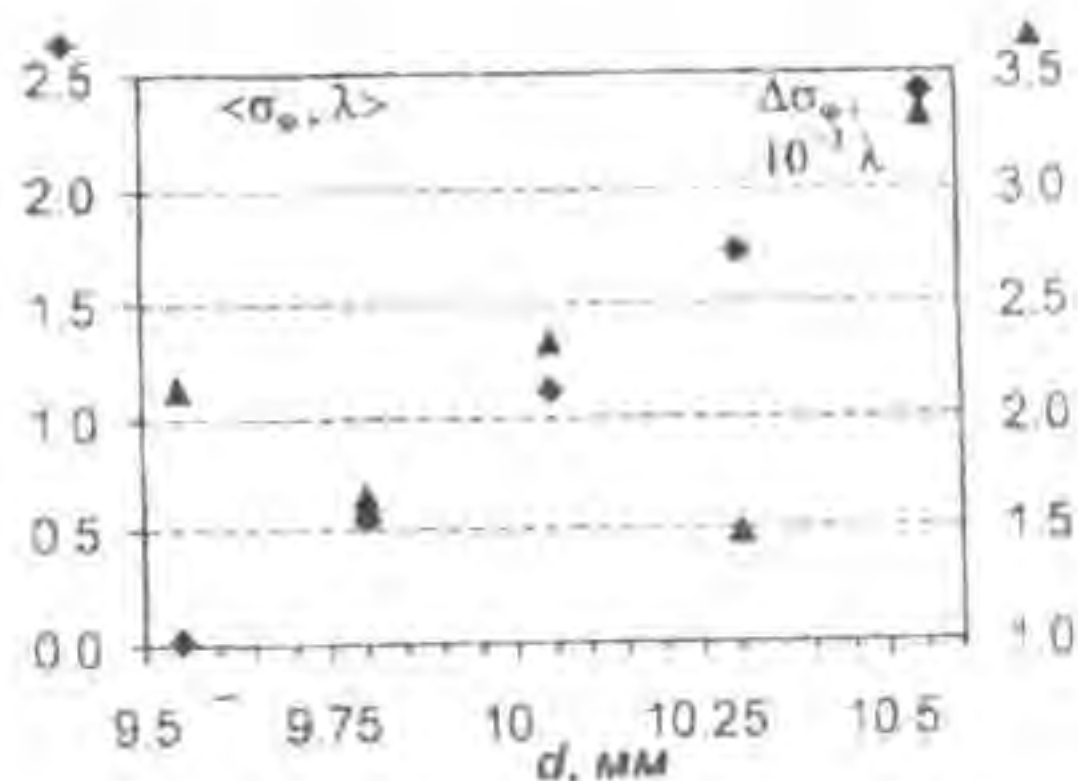
Пучок, відбитий від НПД1, формує опорну хвилю для запису голограми. Відбитий від дзеркала Д2 пучок дає еталонну плоску хвилю. Тестовий хвильовий фронт формується за допомогою системи з об'єктиву Л1 та дзеркала Д1 – при зміщенні дзеркала вздовж оптичної осі об'єктива змінюється кривизна сферичної хвилі на виході цієї системи. За допомогою системи лінз Л2–Л3 площини лінзи Л1 та еталонного дзеркала Д2 переносяться у площину запису голограми. Під час запису голограми в якості опорного використовується один з пучків – тестовий чи відбитий від дзеркала Д2. Запис голограм проводиться на голографічних платівках ПФГ-03М. При вимірюваннях голографічна матриця мікролінз

освітлюється тестовим пучком, при цьому відновлена хвиля формує гартманограну на поверхні ПЗЗ (768×576, розмір пікселя 10 мкм). Для визначення локальних нахилів хвильового фронту використовується масив з 14×14 точок гартманограни, що із врахуванням збільшення системи переносу Л2–Л3 відповідає області діаметром ~2 мм у об'єктній площині. Визначення радіусу кривизни тестового хвильового фронту проводиться за величиною коефіцієнта дефокусування в розкладі відновленого хвильового фронту за поліномами Церніке.

На достовірність відновлення хвильового фронту за допомогою сенсора з голографічною матрицею мікролінз впливає неточність встановлення голограми на місце експонування. Це приводить до виникнення додаткових аберацій у відновленому хвильовому фронті. Ступінь аберацій кількісно можна визначити як стандартне відхилення фази відновленого хвильового фронту від фази плоского хвильового фронту по всій досліджуваній апертурі. Результат серії таких вимірювань представлено на Рис.2а. Середнє стандартне відхилення фази відновленого хвильового фронту від фази плоского хвильового фронту дорівнює $0.22 \pm 0.03 \lambda$. На порядок кращі результати були отримані при візуальному контролі установки голограми на місце експонування. У цьому випадку величина середнього стандартного відхилення фази відновленого хвильового фронту від фази плоского хвильового фронту становить 0.02λ (рис. 2б). На цьому рисунку показано також, як змінюється середня величина стандартного відхилення фази по апертурі для кількох різних положень дзеркала Д1. Вона зростає оскільки внаслідок збільшення кривизни досліджуваного хвильового фронту збільшується і відхилення його форми від форми опорного фронту. Середньоквадратичне відхилення по реалізаціям при цьому змінюється не суттєво і становить близько 0.002λ .



а



б

Рис.2. а) Стандартне відхилення σ_ϕ фази відновленого хвильового фронту від фази плоского хвильового фронту для $n=10$ положень голограми; б) середня величина стандартного відхилення фази по апертурі $\langle \sigma_\phi \rangle$ для кількох різних положень дзеркала Д1 та його розкид $\Delta \sigma_\phi$.

$$A_{3,7}^1 = \left\langle \partial_t + k\partial_x, |\eta|^{m-q} \partial_u, t\partial_t + x\partial_x + mu\partial_u \right\rangle \quad (k > 0, m \neq q, 0 < |q| < 1):$$

$$F = (k^2 - 1)(m - q)(m - q - 1)\eta^{-2}u + |\eta|^{m-2} G(\omega),$$

$$\omega = |\eta|^{1-m} [u_x - (m - q)\eta^{-1}u], \quad \eta = x - kt;$$

$$A_{3,7}^2 = \left\langle \partial_t + kx^{-1}u\partial_u, e^{ktx^{-1}} \partial_u, t\partial_t + x\partial_x + qu\partial_u \right\rangle \quad (k > 0, 0 < |q| < 1):$$

$$F = [k^2x^{-2} + k^2x^{-4}t^2 - 2ktx^{-3}]u + 2ktx^{-2}u_x |x|^{q-2} e^{ktx^{-1}} G(\omega),$$

$$\omega = |x|^{1-q} e^{ktx^{-1}} (u_x + ktx^{-2}u);$$

$$A_{3,7}^3 = \left\langle |t|^{\frac{1}{2}q} \partial_u, |t|^{\frac{1}{2}q} \partial_u, t\partial_t + x\partial_x + (1 + \frac{1}{2}q)u\partial_u \right\rangle \quad (q \neq 0, 1)$$

$$F = \frac{1}{4}q(q-2)t^{-2}u + |t|^{\frac{1}{2}(q-2)} G(\xi, \omega),$$

$$\xi = tx^{-1}, \omega = |t|^{\frac{1}{2}q} u_x;$$

$$A_{3,7}^4 = \left\langle e^{\frac{1}{2}(q-1)u} \partial_u, e^{\frac{1}{2}(1-q)u} \partial_u, \partial_t + k\partial_x + \frac{1}{2}(1+q)u\partial_u \right\rangle \quad (q \neq 0, \pm 1, k \geq 0)$$

$$F = \frac{1}{4}(q-1)^2u + e^{\frac{1}{2}(1+q)u} G(\eta, \omega),$$

$$\eta = x - kt, \quad \omega = e^{-\frac{1}{2}(1+q)u} u;$$

$$A_{3,7}^5 = \left\langle \partial_t + kx^{-1}u\partial_u, |x|^{-q} u\partial_u, t\partial_t + x\partial_x \right\rangle \quad (k \geq 0, q \neq 0, \pm 1):$$

$$F = -u^{-1}u_x^2 - q(q+1)x^{-2}u \ln |u| + k(q-1)(q+2)tx^{-3}ux^{-2}G(\omega),$$

$$\omega = xu^{-1}u_x + q \ln |u| + k(1-q)tx^{-1}.$$

$A_{3,8}$ — інваріантні рівняння

$$A_{3,8}^1 = \left\langle \cos t \partial_u, -\sin t \partial_u, \partial_t + k\partial_x \right\rangle \quad (k \geq 0):$$

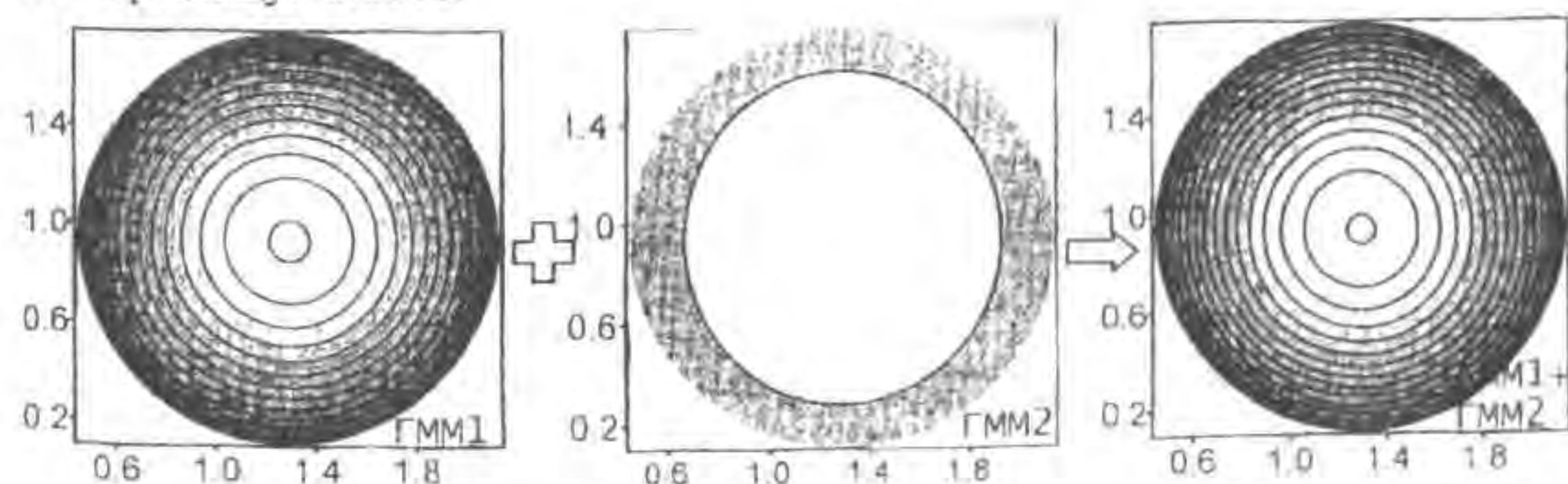
$$F = -u + G(\eta, u_x), \quad \eta = x - kt;$$

$$A_{3,8}^2 = \left\langle |t|^{\frac{1}{2}} \cos(\ln |t|) \partial_u, |t|^{\frac{1}{2}} \sin(\ln |t|) \partial_u, t\partial_t + x\partial_x + \frac{1}{2}u \partial_u \right\rangle$$

$$F = -\frac{5}{4}t^{-2}u + |t|^{\frac{3}{2}} G(\xi, \omega),$$

$$\xi = tx^{-1}, \quad \omega = |t|^{\frac{1}{2}} u_x.$$

Слід зауважити, що вимірювальні діапазони голограм частково перекривались. Це дозволило порівняти результати вимірювань, які проводились за допомогою різних голограм. Топограми на рис. 4 представляють результат відновлення форми хвильового фронту в одній з точок перекриття ($d = 7.05\text{ мм}$), одержаний за допомогою двох послідовно записаних матриць голографічних мікролінз. На рис. 4а показано топограму хвильового фронту, який був відновлений за допомогою першої голограми у точці $d = 6.55\text{ мм}$. Цей хвильовий фронт був опорним при записі другої голограми. Рис 4б відображає форму хвильового фронту, який був реконструйований за даними вимірювань другою матрицею мікролінз у діапазоні переміщень дзеркала ДЗ1 від $d = 6.55\text{ мм}$ до $d = 7.05\text{ мм}$. Повну ж форму хвильового фронту, одержану завдяки спільній обробці даних обох вимірювань, зображено на рис. 4в. Цей результат досить добре співпадає з даними, що були одержані для цього ж хвильового фронту за допомогою першої голографічної матриці. Стандартне відхилення різниці фаз хвильових фронтів, відновлених різними голограмами, становить 0.07λ . Відносна різниця у значеннях радіусу кривизни хвильового фронту, які були визначені за допомогою першої голограми та суперпозицією результатів першої та другої голограм, не перевищує 0.05% .



а) $R=46.2\text{ мм}$, $d=6.55\text{ мм}$ б) $R=346.7\text{ мм}$, $d=7.05\text{ мм}$ в) $R=40.8\text{ мм}$, $d=7.05\text{ мм}$
Рис.4. Топограми хвильового фронту: а) опорного для 2-ї голограми; б) відновленого на 2-ій ітерації; в) повна форма хвильового фронту. Лінії рівної фази проведені інтервалом 1λ .

Таким чином, в представленій роботі запропоновано ітераційний метод реєстрації матриць голографічних мікролінз для сенсора хвильового фронту. Показано, що застосування трьох ітерацій при запису голограм дозволяє збільшити кутовий вимірювальний діапазон голографічного сенсора у 2.8 рази в порівнянні із рефракційним сенсором з такими ж характеристиками. Використання реверсивних матеріалів для реєстрації матриць голографічних мікролінз дозволить реалізувати сенсор, який легко адаптується до динамічних змін хвильового фронту. Такий сенсор може знайти застосування в оптичній метрології, наприклад, для тестування деформацій відбиваючої поверхні у реальному масштабі часу.

Література

1. G.Rousset. Wavefront sensing // Adaptive Optics for Astronomy. Ed. D. M. Alloin and J.-M. Mariotti. – NATO ASI Series: Kluwer Academic Publ., 1994. – P. 116–137.
2. G.-M. Dai. Modal wavefront reconstruction with Zernike polynomials and Karhunen-Loeve functions // J. Opt. Soc. Am. – 1996. – A 13. – 1218–1225.
3. Д.В. Поданчук, В.П. Данько, М.М. Котов. Голографічний сенсор хвильового фронту // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2002. – Вип. 1. – С. 355–361.
4. J.Y. Son, D.V.Podanchuk, V.P.Danko, K.D.Kwak. Shack-Hartmann wavefront sensor with holographic memory // Optical engineering, 2003, v.42, №11, P. 3389-3398.
5. В.П.Данько, М.М.Котов, Д.В.Поданчук, С.В.Давиденко. Сенсор Шека-Хартмана на основі матриці двофокусних голографічних мікролінз // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2003. – Вип. 1. – С. 355 – 361.
6. М.М. Kotov, V.P.Dan'ko, D.V.Podanchuk. Nonlinear holographic lenslet array for Shack-Hartmann wavefront sensor. Proc. of the 5th International Young Scientists' Conference on Applied Physics. – Kyiv (Ukraine). – 2005. – P. 46-47.

Надійшла до редакції 20.01.2006

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 532.536

Альошин О.Д., проф., д. ф.-м. н.

Радіус кореляції і рівняння стану обмежених систем поблизу критичної точки

За даними гравітаційного ефекту в макронееоднорідних системах аналізується поведінка речовини в малих обмежених флуктуаційних системах поблизу критичної точки. На основі флуктуаційної теорії фазових переходів прогнозується поведінка радіуса кореляції і вигляд рівняння стану в таких обмежених системах.

Ключові слова: флуктуація, обмежені системи

E-mail: alekhin@mail.univ.kiev.ua

O.D. Alekhin, Prof., Dr. Sc.

Correlation length and equation of state for confined systems near the critical point

Behaviour of substance in small confined fluctuation systems near the critical point have been analyzed by gravity effect data in macroinhomogeneous systems. Behaviour of correlation length and form of equation of state in these systems have been predicted on the base of fluctuation theory of phase transitions.

Key Words: fluctuation, confined systems

На даний час впродовж інтенсивних досліджень критичного стану речовини в макроскопічних системах [1,2] значної актуальності набув науковий напрямок вивчення так званих обмежених систем, розмір яких L близький до величини радіуса кореляції R_c поблизу критичної точки (КТ). Для таких систем М. Фішером [3,4] запропоновані рівняння для R_c і термодинамічного потенціалу $\Phi_{\text{снг}}$ у вигляді

$$R_c = L f_{R_c}(x, y) = L f_{R_c}(atL^{1/\nu}, b\Delta\mu L^{1/\xi}) \quad (1)$$

$$\Phi_{\text{снг}} = L^{-d} f_{\Phi_{\text{снг}}}(x, y) = L^{-d} f_{\Phi_{\text{снг}}}(atL^{1/\nu}, b\Delta\mu L^{1/\xi}) \quad (2)$$

Тут f_{R_c} і $f_{\Phi_{\text{снг}}}$ – масштабні функції змінних x і y ; $t = (T - T_k)/T_k$; $\Delta\mu = (\mu - \mu_k)/\mu_k$; T_k , μ_k – критичні значення температури і хімічного потенціалу; ν і ξ – критичні показники радіуса кореляції [1]. В загальному вигляді при $L \rightarrow R_c$ вид функцій f_{R_c} , $f_{\Phi_{\text{снг}}}$ – не визначений. Але у випадку $L \rightarrow \infty$ рівняння (1), (2) переходять у рівняння флуктуаційної теорії фазових переходів ФТФП [1]. Для обмежених систем ($L \rightarrow R_c \sim t^{-\nu}$, $L \rightarrow R_c \sim \Delta\mu^{-\xi}$) виходячи з (1) [3-4] знаходимо, що $\Delta\mu \sim L^{-1/\xi}$ і $t \sim L^{-1/\nu}$.

На основі [3,4] в роботах [5,6] аналізуються властивості обмежених систем, розмір яких L не перевищує радіус кореляції речовини ($L \leq R_c \approx r_0 t^{-\nu}$, $r_0 \approx (10-100) \text{ \AA}$). Як видно, величини амплітуд r_0 на один-два порядки більші експериментальних значень цих величин [7,8].

В даній роботі розглянемо якісно іншу малу обмежену систему, яка характеризується розміром $L \geq 2R_c = 2r_0 \tau^{-\nu}$, де величина амплітуди r_0 , згідно експериментальних даних [7,8], дорівнює $r_0 \approx 2 \div 3 \text{ \AA}$. На основі ФТФП [1] і аналізу експериментальних даних неоднорідних макроскопічних систем [8,9] можна очікувати, що густина речовини всередині таких флуктуацій ρ_f значно відрізняється від критичної ($\rho_f(L \approx 2R_c) \approx 2\rho_c$). Це повинно привести також до значної радіальної зміни поля в середині флуктуації ($\Delta u(r)$) [1]. Виходячи з цього, об'єм флуктуації $v_f = 4/3 \cdot \pi R_c^3 \approx 1/2 \cdot v = L^3/2$ ($2R_c < L$).

Крім того аналіз даних [8,9] показав також, що внаслідок теплового флуктуаційного руху молекул речовини навіть в системах розміром L_0 , значно більшим за радіус кореляції ($L_0 = 10^{-2} \text{ t}^{1/5} \text{ см} \gg R_c$) повністю відсутнє явище гравітаційного ефекту.

Звернемо тепер увагу на те, що головним чинником, який визначає і обмежує зростання радіусу кореляції в малій системі є не просто її розмір L , а загальна кількість молекул речовини в об'ємі $v = L^3$.

В макроскопічній системі основна маса молекул речовини M знаходиться у N_f великомасштабних флуктуаціях, за винятком деякої незначної маси молекул ΔM за їх межою. Тобто

$$M = M_f + \Delta M = v_f \cdot \rho_f + \Delta M \quad (3)$$

В таких системах завжди $N_f \gg 1$ і $M_f \gg \Delta M$ і тому флуктуаційна частина термодинамічного потенціалу представляється у вигляді [1]

$$F_f = N_f k_B T, \quad (4)$$

Згідно [3,4] обмеженими системами ($L \geq 2R_c$) поблизу КТ вважаються лише такі, які містять тільки незначну кількість флуктуацій ($N_f \approx 1 \div 3$). При формуванні цих флуктуацій поблизу критичної температури ($t \leq 10^{-6} \div 10^{-7}$), коли $N_f \Rightarrow 1$, маса молекул речовини за межами флуктуації може бути близькою до маси окремої флуктуації. Тобто для таких систем $\Delta M \leq M_f$ і тоді співвідношення (4) перестає виконуватись. З нашої точки зору, саме в цьому випадку слід застосовувати рівняння (1), (2) [3,4].

Тонкі ж плівки товщиною L і циліндри-капіляри необмеженої в напрямку $X \gg L$ довжини [5,6], для яких загальне число флуктуацій $N_f(X) \gg 1$ і їх розмір $R_c(X) \gg L$, не можуть бути визнані справжніми обмеженими системами [3,4].

Водночас припускаючи, що перехід від властивостей речовини макросистем до мікросистем [3,4] відбувається поступово, можна на основі (1), (2) і (4) [1-4] запропонувати наступні рівняння радіусу кореляції $R_c(L, \mu)$ і термодинамічного потенціалу $\Phi_{\text{сист}}$:

вздовж напрямку критичної ізохори $Z_1^* = \Delta\mu/t^{v/\xi} \ll 1$

$$R_c^{-1} = (L f_{R_c})^{-1} = t^v \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n Z_1^{*2n} \right), \quad \Phi_{\text{сннг}} = L^{-d} f_{\Phi_{\text{сннг}}} = t^{3v} \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n Z_1^{*2n} \right)^3, \quad (5)$$

вздовж напрямку критичної ізотерми $Z_2^* = t/\Delta\mu^{\xi/v} \ll 1$

$$R_c^{-1} = (L f_{R_c})^{-1} = \Delta\mu^{\xi} \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n Z_2^{*n} \right), \quad \Phi_{\text{сннг}} = L^{-d} f_{\Phi_{\text{сннг}}} = \Delta\mu^{3\xi} \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n Z_2^{*n} \right)^3, \quad (6)$$

При цьому в рівняннях (5)-(6) при переході від систем макроскопічних ($L \gg 2R_c$) до малих, обмежених ($L \rightarrow 2R_c$) слід поступово враховувати залежність хімічного потенціалу $\Delta\mu(L)$ від лінійного розміру системи L . Так, якщо для систем макроскопічних, згідно [8] $\Delta\mu \sim \text{const}/(1+\epsilon L) \sim L^{-\xi}$ ($\xi \approx 0,4$), то для обмежених, згідно М.Фішера [3,4], ця залежність значно зростає ($\Delta\mu \sim L^{-1/\xi}$, $t \sim L^{-1/v}$).

Тоді на основі (5)-(6) можна знайти рівняння стану речовини в обмежених системах: $\Delta p = d\Phi/d\mu$; $\beta_T = dp/d\mu = d^2\Phi/d\mu^2$. В загальному ж вигляді рівняння стану обмежених систем ($L \geq 2R_c$) [3,4] можна представити за допомогою рівнянь параметричного скейлінгу [10].

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. – М.: Наука, 2-е изд., перераб. 1982. – 382 с.
2. Анисимов М.А. Критические явления в жидкостях и жидких кристаллах. Наука, Москва (1987).
3. M.E. Fisher, M.N. Barber. // Phys. Rev. Lett. 1972. – 28 – 1516.
4. K. Binder // Annu. Rev. Phys. Chem. – 1992. – Vol. 43 - P. 33-59.
5. A.V. Chalyi, K.A. Chalyi, L.M. Chernenko, A.N. Vasil'ev. // Cond. Matt. Phys. – 2000. – Vol. 3., N 2 (22), - P. 335-358.
6. Чалый К.О. // УФЖ. – 2004. – Т. 49, № 11. – С. 1093–1097.
7. Алехин А.Д. // ЖЭТФ – 1977. – Т. 72, N 5. – С. 1880–1884.
8. Алехин А.Д. Критические явления жидкость–пар в гравитационном поле: Дис... д-ра физ.-мат.наук: 01.04.14. – Киев, 1994. – 296 с.
9. Алехин А.Д. // Оптика и спектр. – 1979. – Т. 47, № 4. – С. 788–792.
10. Schofield P. // Phys. Rev. Lett. – 1969. – V.22, N 12. – P.606.

Надійшла до редколегії 30.11.2005

УДК 539.213

М.Г. Бабич, пров.інж.,
М.І. Захаренко¹, доц.,
М.П. Семен'ко², доц.,
М.В. Орленко, студ.

Термомагнітна поведінка складнолегованих аморфних сплавів на основі $\text{Fe}_{84}\text{Si}_2\text{B}_{14}$

Методом Фарадея в інтервалі температур 300 - 900 К досліджені температурні залежності магнітної сприйнятливості $\chi(T)$ складнолегованих аморфних сплавів на основі $\text{Fe}_{84}\text{Si}_2\text{B}_{14}$. Проаналізовані закономірності зміни температури Кюрі та локалізованого магнітного моменту при легуванні. Виявлені закономірності можуть бути пов'язані з утворенням магнітних неоднорідностей різного типу. Визначені інтервали термічної стабільності досліджених аморфних сплавів.

Ключові слова: аморфний сплав, температура Кюрі, магнітний момент, термічна стабільність.

¹ E-mail: zakharenko@univ.kiev.ua

² E-mail: smp@univ.kiev.ua

Завдяки малим втратам на перемагнічування та порівняно високому рівню намагніченості насичення аморфні металеві сплави (АМС) на основі системи Fe-Si-B широко використовуються у виробництві магнітних елементів для різноманітних електронних пристроїв. Ці властивості можуть бути суттєво модифіковані, якщо базові АМС легуються перехідними металами. Так, для прикладу, комплексне легування базових складів Ni та Mo збільшує питоме значення електричного опору з 90-120 до 130-160 $\mu\Omega\cdot\text{cm}$, що значно зменшує втрати енергії на вихрові струми [1], та суттєво впливає на температуру кристалізації T_x і на більшість магнітних параметрів [2]. Особливо перспективним в цьому відношенні є використання декількох (трьох, чотирьох і більше) легуючих компонентів, що суттєво розширює можливість цілеспрямованого керування функціональними властивостями АМС. Як правило, як легуючі домішки використовують кобальт, молібден, ніобій та марганець. Їх поєднання

M.G. Babich, eng.,
M.I. Zakharenko, assoc.prof.
M.P. Semen'ko², assoc.prof.
M.V. Orlenko, student.

Thermomagnetic behavior of the complexly doped amorphous alloys on the base of $\text{Fe}_{84}\text{Si}_2\text{B}_{14}$

Temperature dependencies of magnetic susceptibility $\chi(T)$ of the complexly doped amorphous alloys on the base of $\text{Fe}_{84}\text{Si}_2\text{B}_{14}$ have been studied in the temperature range 300-900 K using the Faraday technique. The regularities of the Curie temperature and localized magnetic moment variation upon doping have been analyzed. The revealed regularities could be related with the formation of magnetic inhomogeneities of different type. The intervals of thermal stability of the studied amorphous alloys have been determined.

Key Words: amorphous alloys, Curie temperature, magnetic moment, thermal stability.

істотно змінює рівень магнітної проникності, константу магнітострикції та втрати на перемагнічування.

В даній роботі представлено результати дослідження деяких магнітних характеристик та параметрів термічної стабільності складнолегованих (при одночасному легуванні Ni, Mo, Nb та Mn і Co) аморфних сплавів на основі $\text{Fe}_{84}\text{Si}_2\text{B}_{14}$.

Приготування зразків та методика експерименту. В якості об'єктів досліджень були використані аморфні металічні сплави на основі $\text{Fe}_{84}\text{Si}_2\text{B}_{14}$ у формі стрічок шириною 20–25 мм і товщиною 28–40 мкм. Досліджувані АМС відрізняються вмістом легуючих домішок (Ni, Mo, Co, Mn, Nb). Їх склад наведений в Таблиці.

Всі сплави були виготовлені методом спінінгування розплаву з використанням вихідних компонентів високої чистоти. Температура плавлення перед ежектування розплаву складала 1300–1350°C, швидкість обертання диска з хромистої бронзи, діаметром 600 мм – 820–850 хв⁻¹.

Магнітну сприйнятливість χ в інтервалі температур $T=300\text{--}900$ К вимірювали методом Фарадея на автоматизованому магнітометрі в середовищі гетерованого аргону. Відносна похибка у визначенні χ не перевищувала 1%. Швидкість зміни температури при одержанні термомагнітних кривих $\chi(T)$ складала 8 К/хв.

Експериментальні результати та їх обговорення. Температурні залежності магнітної сприйнятливості $\chi(T)$, отримані за викладеною вище методикою, виявилися подібними для всіх досліджуваних АМС. Як приклад, на рис. 1 та 2 наведені типові з отриманих залежностей $\chi(T)$.

Загальний характер термомагнітних кривих є подібним для всіх досліджених зразків і дозволяє зробити висновок, що вони є феромагнітними при не дуже високих температурах. При зростанні температури намагніченість зразків швидко зменшується і при досягненні

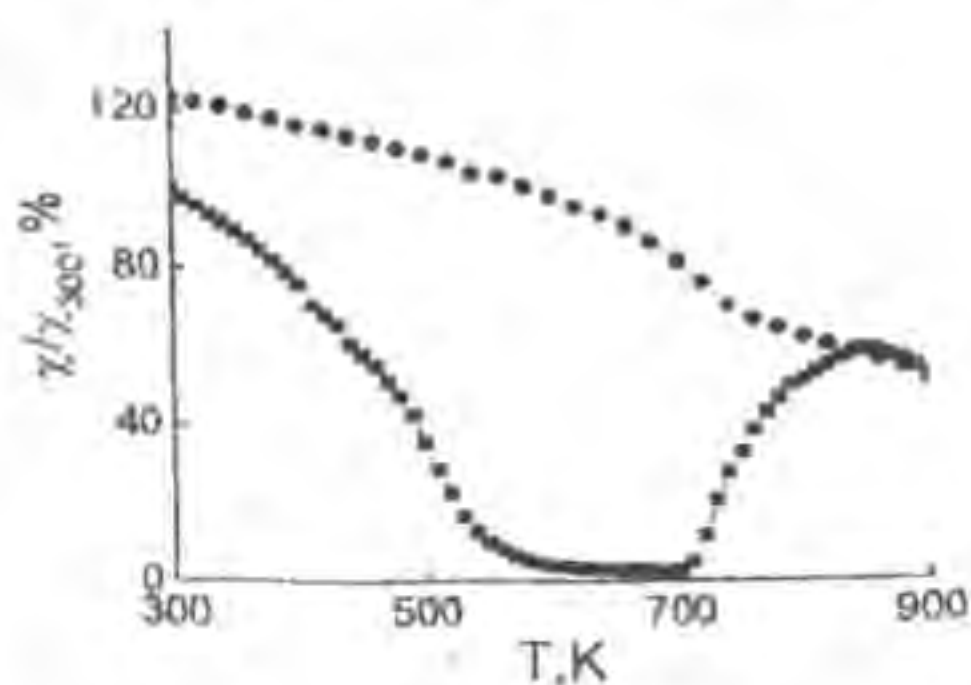


Рис.1. Температурні залежності магнітної сприйнятливості АМС $\text{Fe}_{74}\text{Nb}_2\text{Co}_2\text{Ni}_4\text{Mo}_2\text{B}_{14}\text{Si}_2$ (■ – нагрівання, ● – охолодження).

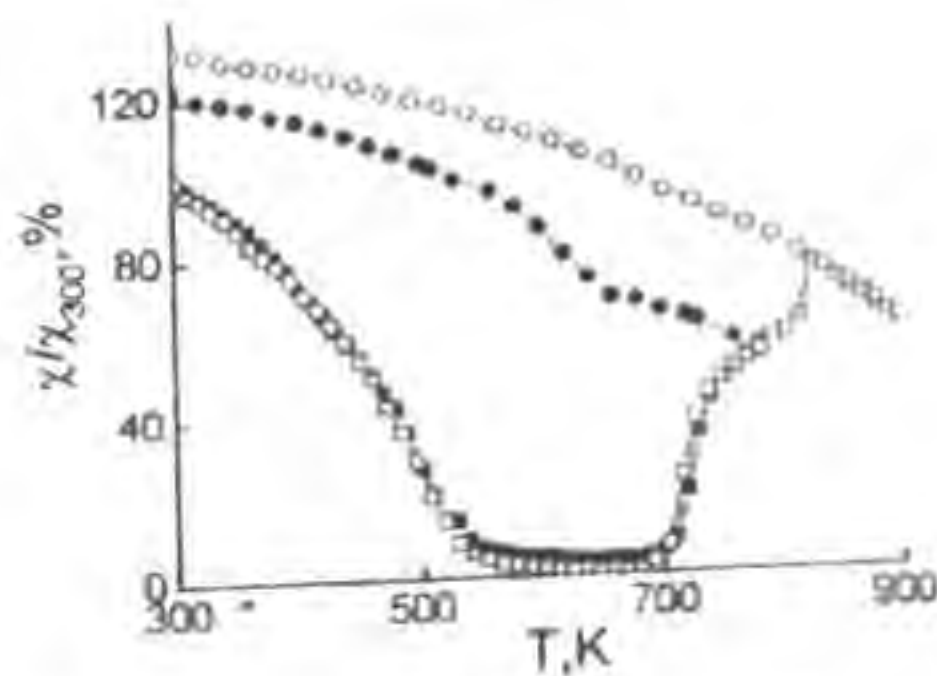


Рис.1. Температурні залежності магнітної сприйнятливості АМС $\text{Fe}_{76.5}\text{Nb}_{0.5}\text{Co}_2\text{Ni}_1\text{Mo}_2\text{Mn}_2\text{B}_{14}\text{Si}_2$ (■, □ – нагрівання, ●, ○ – охолодження).

певної температури, яка є точкою Кюрі аморфного стану T_c вони характеризуються більш або менш широкою областю (130-150 K) існування парамагнетизму у межах стабільності аморфного стану. При подальшому нагріванні спостерігається суттєве зростання сприйнятливості завдяки утворенню феромагнітних кристалічних фаз з набагато вищими, ніж у аморфному стані, температурами Кюрі.

Таблиця. Хімічний склад, температура Кюрі (T_c), температури початку ($T_{\text{м}}$) та закінчення ($T_{\text{ж}}$) кристалізації та магнітний момент у розрахунку на атом магнітоактивного елемента (μ_m) складно-легованих АМС на основі $\text{Fe}_{84}\text{B}_{14}\text{Si}_2$.

№ АМС	Склад	T_c , К	$T_{\text{м}}$, К	$T_{\text{ж}}$, К	μ_m , μ_B
1	$\text{Fe}_{74}\text{Nb}_2\text{Co}_2\text{Ni}_4\text{Mo}_2\text{B}_{14}\text{Si}_2$	540	682	840	4,45
2	$\text{Fe}_{76.5}\text{Nb}_{0.5}\text{Co}_2\text{Ni}_1\text{Mo}_2\text{Mn}_2\text{B}_{14}\text{Si}_2$	538	672	825	4,04
3	$\text{Fe}_{73}\text{Nb}_{0.5}\text{Ni}_4\text{Mo}_{4.5}\text{Mn}_2\text{B}_{14}\text{Si}_2$	438	690	830	4,26
4	$\text{Fe}_{77.5}\text{Nb}_{0.5}\text{Ni}_1\text{Mo}_3\text{Mn}_2\text{B}_{14}\text{Si}_2$	449	692	830	4,26
5	$\text{Fe}_{78}\text{Nb}_{0.5}\text{Ni}_1\text{Mo}_{4.5}\text{B}_{14}\text{Si}_2$	430	672	840	4,40
6	$\text{Fe}_{76.5}\text{Nb}_{0.5}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{B}_{14}\text{Si}_2$	515	672	820	4,49

Значення температури Кюрі досліджених АМС визначались за кривими $\chi(T)$ стандартним способом [3] і наведені у Таблиці. З їх порівняння видно, що максимальні значення T_c притаманні не зразкам з максимальним вмістом заліза, як це слід було очікувати, виходячи з наявних у літературі даних [4], а тим АМС, що містять домішки Со. Така поведінка T_c відображає зміну величини обмінної взаємодії при легуванні і свідчить про сильну феромагнітну взаємодію між атомами магнітоактивних елементів. При додаванні до АМС молібдену і особливо марганцю спостерігається суттєве зменшення температури Кюрі, що може бути зумовлене антиферомагнітним характером взаємодії зазначених домішок з атомами магнітоактивних компонентів. Дійсно, для аморфних феромагнітних сплавів типу ПМ-М, як відомо, застосовна модель Гейзенберга. За цією моделлю всі атомні магнітні моменти (спіни) повністю локалізовані і мають цілком визначену величину, а обмінна взаємодія між ними призводить до встановлення феромагнітного порядку. Згідно моделі Гейзенберга, величини T_c прямо пов'язані з обмінним інтегралом J_{ij} , який описує взаємодію d -електронів атомів метала у сусідніх вузлах ґратки i та j [5].

$$T_c = \frac{2S(S+1)}{3k_B} \sum_{i,j} J_{ij} \quad (1)$$

де S - спінове число атома, k_B - постійна Больцмана, сумування проводиться по всіх найближчих сусідах.

Величина обмінної взаємодії визначається природою найближчих сусідів і тому T_c феромагнітних аморфних сплавів чутлива до будь-якої зміни у хімічному та топологічному ближніх порядках в АМС. Отже, знайдені зміни температури Кюрі при легуванні базового АМС безпосередньо відображає збільшення обмінної взаємодії в системі d -електронів при додаванні Co та Ni та її зменшення при додаванні Mo та Mn. Така модифікація обмінних інтегралів у загальній картині обмінних взаємодій, як відомо, може супроводжуватися утворенням магнітних неоднорідностей (кластерів) з різним характером спінового упорядкування [6]. Додаткову інформацію щодо утворення кластерів дає величина локалізованого магнітного моменту.

Значення локалізованого магнітного моменту у розрахунку на атом магнітоактивного елемента (Fe, Co, Ni) μ_M визначали з температурних залежностей парамагнітної сприйнятливості для інтервалу температур $T_c > T > T_x$ за сталою Кюрі C [7], використовуючи рівняння:

$$\mu_M = 2.84 \sqrt{C} / c_M, \quad (2)$$

де c_M - атомна частка магнітоактивних компонентів. Одержані значення μ_M наведені у Таблиці. Видно, що для всіх досліджених АМС локалізований магнітний момент виявився помітно більшим, ніж навіть відповідна величина для парамагнітного заліза [7], що може свідчити про формування феромагнітних атомних кластерів при легуванні базового АМС кобальтом та нікелем. Разом з тим, додавання до АМС атомів молібдену і особливо марганцю супроводжується суттєвим зменшенням μ_M . Цей факт, на нашу думку, може бути зумовлений тим, що зазначені домішкові атоми стимулюють формування антиферомагнітних кластерів з майже скомпенсованим магнітним моментом. Це добре узгоджується з наведеними вище закономірностями зміни температури Кюрі при легуванні. Проведені нами оцінки розмірів антиферомагнітних кластерів свідчать про те, що кожен атом Mn гасить магнітні моменти приблизно восьми магнітоактивних атомів у своєму найближчому оточенні.

Як уже відмічалось, кристалізація досліджуваних АМС супроводжується суттєвим зростанням сприйнятливості завдяки утворенню феромагнітних кристалічних фаз з набагато вищими, ніж у аморфному стані, температурами Кюрі. В Таблиці наведені значення температур початку (T_{xn}) та закінчення (T_{xc}) кристалізації. Навіть побіжний аналіз цих результатів вказує на те, що кристалізація досліджуваних АМС

відбувається у досить широкому температурному інтервалі, а величина $T_{\text{от}}$ зростає при легуванні АМС Nb та Mo. Форма вітки охолодження кривих $\chi(T)$ свідчить про те, що після нагрівання до 900 К утворюються дві феромагнітні фази, точки Кюрі яких залежать від складу вихідного АМС. Як відомо, кристалізація подібних АМС відбувається за схемою: АМС $\rightarrow$ α -Fe(Me, Si) + Fe(Me)₃B (за даними рентгенівського фазового аналізу така схема виявилася справедливою і для досліджуваних АМС). Остання з фаз є метастабільною і при певній температурі розпадається на α -Fe і Fe₂B, причому ця температура суттєво залежить від природи домішок (див. Відмінності між кривими на Рис. 1 та 2).

Висновки

Комплексне легування АМС на основі Fe₈₄Si₂B₁₄ супроводжується суттєвою модифікацією загальної картини обмінних взаємодій, у результаті чого в сплавах утворюються магнітні неоднорідності з феромагнітним та антиферомагнітним упорядкуванням магнітних моментів атомів. Термічна стабільність АМС дещо зростає при легуванні ніобієм та молібденом.

Література

1. Nemoshkalenko V.V., Maslov V.V., Nosenko V.K., Paderno D.Yu. Rapidly quenched amorphous and microcrystalline alloys as a new class of materials. Production and application // Met.Phys.and Adv.Technol. – 1994. – 16. – p.5–9.
2. Maslov V., Nakonechna O., Nosenko V., et al. Thermomagnetic investigations of the Fe₈₂Si₂B₁₆ based metallic glasses // Functional Materials. – 2000. – 7. – p. 822–826.
3. Вонсовский С.В. Магнетизм. – М.: Наука, 1971. – 1032 с.
4. Dolocan V., Dolocan E. Curie temperatures of amorphous Fe-B-Si// JMMM. - 1992. – 117. – N 1-2. – p. 133–137.
5. Хандрих К., Кобе С. Аморфные ферро- и ферримагнетики. М.: Мир, 1982. – 338 с.
6. Шпак А.П., Куницький Ю.А., Захаренко М.І., Волощенко А.С. Магнетизм аморфних та нанокристалічних систем. – К.: Академперіодика, 2003. – 232 с.
7. Babich M., Atmani H., Semen'ko M., Zakharenko M. The investigation of FeZrB nanoperm-type metallic glass // Mater. Sci. Forum. – 2001. – 373 – 376. – p. 281–285.

Надійшла до редакції 26.12.2005

УДК 538.22

Беженар А.А., аспірантка
Копань В.С., професор
Магдич В.Д., студентка

Повзучість фторопласту в модельному композиційному матеріалі

Показано, що в зазорах між електропровідними сферичними частинками модельного композиційного матеріалу фторопласт-сталь повзучість здійснюється при напругах, що на порядок більші за напруги повзучості вільних плівок. Повзучість в зазорі наростає при збільшенні напруженості електричного поля. Це вказує на ослаблення міжатомних сил внаслідок поляризації діелектрика.

Ключові слова: діелектрик, повзучість, поляризація.

A.A. Bezhenar, post-graduate
V.S. Kopan, professor
V.D. Magdich, student

Creep of fluoroplastic in model composite material

It is shown that in gaps between the electroconductive spherical particles of model composite material fluoroplastic-steel the creep is carried out at stress, that on an order higher than creep stress of free films. A creep in a gap grows at the increase of tension of the electric field. It indicate on decrease of interatomic forces as a result of polarization of dielectric.

Key Words: dielectric, creep, polarization.

*E-mail: R10@univ.kiev.ua; kopa@pulsary.com.ua

Композиційні матеріали (КМ) провідник-діелектрик широко використовуються в твердотільній електроніці (гетерогенні багат шарові структури), в електротехніці (електроопори), автоматичні (мембрани, що змінюють електроопір при дії на них тиску рідини чи газу), в авіації (фарби, що ослаблюють відбивання імпульсів радіолокатора) тощо. Властивості КМ залежать від параметрів діелектрика та армуючих частинок, від явищ в зазорах діелектрик-частинка, від напруженості електричного поля і механічних напруг в цих зазорах, від електронної емісії і тунелювання, неоднорідностей на границях контакту частинок.

Електропровідність КМ стає непередбачуваною при збільшенні напруженості електричного поля – на вістрях частинок може спостерігатись імпульсна електронна емісія [1, 2], локальне збільшення температури [3], електромасоперенос. Згадані явища спостерігаються в повному наборі, коли концентрація електропровідних частинок менша за порогову (перколяційну), коли більшість частинок розділені тонкими прошарками діелектрика.

Мета роботи – дослідження електропровідності КМ метал-фторопласт на модельному зразку.

Експериментальні результати та їх обговорення

Модельний зразок КМ являв собою вертикальну скляну трубку, наповнену стальними кулями в один вертикальний ряд. Діаметр куль 8 мм, кількість – 11. Кулі розділені фторопластовими плівками товщиною 0,022 мм кожна. Ряд куль навантажувався тягарами. Зменшення висоти ряду внаслідок повзучості вимірювалось мікрометром з ціною поділки 0,001 мм. До ряду прикладалась напруга величиною 0 – 400 В. Вимірювався електрострум в залежності від часу, електронапруги, механічної напруги.

Такий ланцюг із куль та плівок являє собою спрощену модель одномірного композиційного матеріалу (КМ) провідник – діелектрик. Електричний контакт між двома кулями розпочинається в першу чергу там, де найменша товщина плівки. Чим більший тиск тягарів, тим менша товщина плівок, тим більша напруженість поля, і тим раніше зазор почне проводити електрику. Подібне можна зустріти і в КМ, але там електропровідні частинки складні по формі [4]. В модельному одномірному “композиті” роль частинок відіграють кулі [5, 6].

Спочатку працювали з установкою без підключення електричного кола. Вимірювали зміну довжини зразка під дією навантажень 2Н, 5Н, 7Н, 10Н, 20Н, 30Н, 40Н, 45Н, 50Н, 55Н на протязі 50 хвилин після зміни навантаження. Найбільший час вимірювання повзучості плівок 7 діб. Потім виміряли розміри кожної витисненої кулею лунки на кожній плівці і знайшли середній діаметр лунки $D = 304$ мкм. Середня площа лунки $S = 8 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2$. Тиск, що діяв при різних навантаженнях, – це навантаження, поділене на середню площу лунки. Значення відносного стискання плівок фторопласту знаходили за формулою $\varepsilon = \Delta L/L$, де L – початкова товщина всіх плівок, ΔL – зміна товщини всіх плівок при навантаженні.

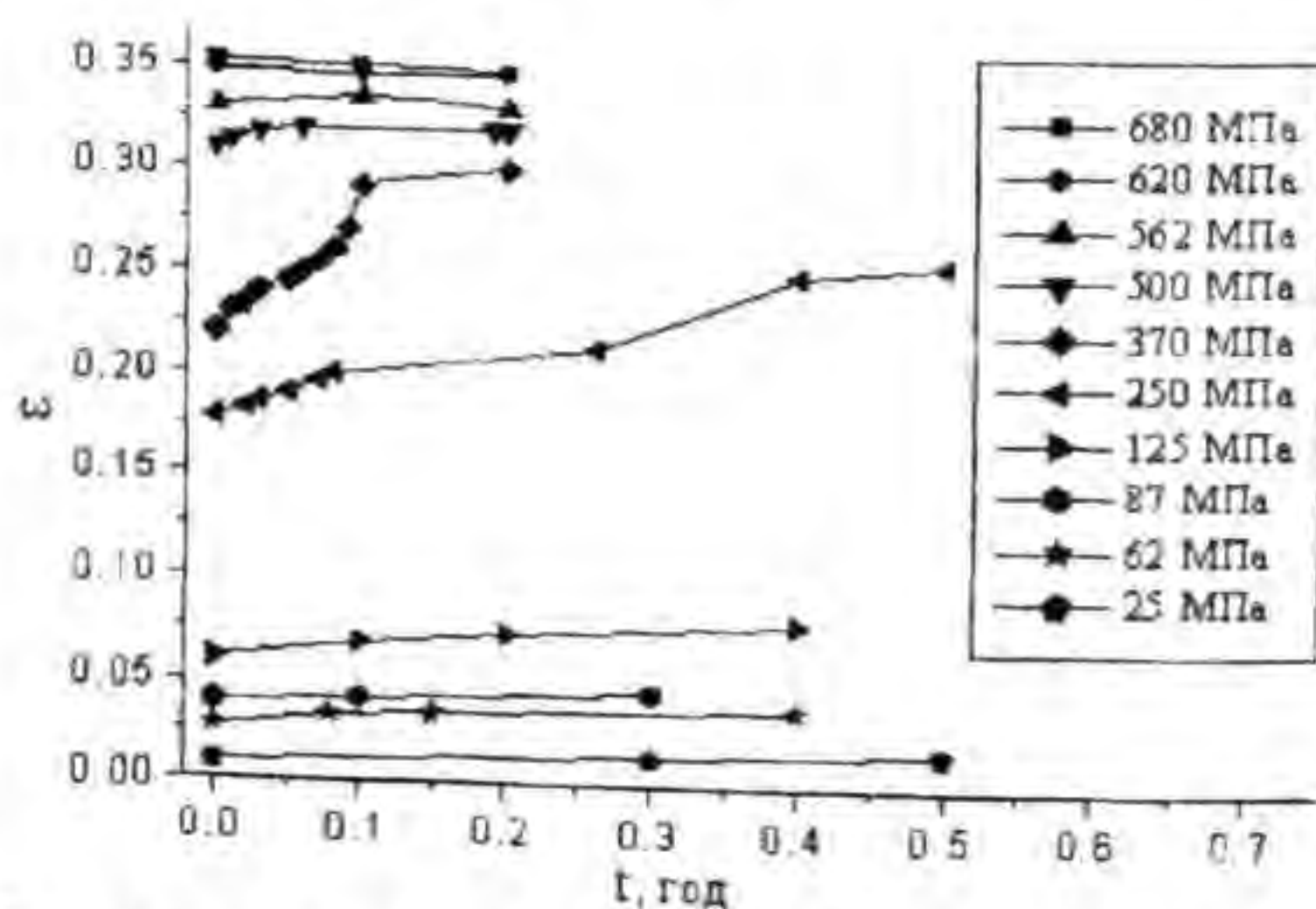


Рис. 1. Залежність відносного стискання ε плівок фторопласту від часу t при різних тисках p

За цими даними побудували залежності відносного стискання ϵ плівок фторопласту від часу t (рис.1). Чим більший тиск p на плівки, тим більше їх відносне стискання. На кривих повзучості є початкові ділянки зі змінною швидкістю та кінцеві з постійною. Повзучість контролюється в'язкістю фторопласту в зазорі. При малих тисках ($2,5 \cdot 10^7$ Па – $25 \cdot 10^7$ Па) повзучість проходить повільно, з постійною швидкістю. Починаючи з тиску $25 \cdot 10^7$ Па і до $50 \cdot 10^7$ Па, повзучість спочатку різко зростає з часом, а потім проходить з постійною малою швидкістю. Від $p = 56,2 \cdot 10^7$ Па до $68 \cdot 10^7$ Па повзучість знову проходить повільно. Характерно, що в зазорах повзучість плівок здійснюється при великих тисках, які характерні для металу. Це пояснюється тим, що плівки затиснуті між металевими кулями, тому повзучість в значній мірі контролюється явищем видавлювання плівок із зазору між кулями. При великих тисках p товщина лунок була малою, видавлювання фторопласту з зазорів уповільнювалось. Тому ϵ було малим. Подібне явище повинно спостерігатись і в КМ. Отже, повзучість вільного зразка плівки кардинально відрізняється від повзучості в КМ.

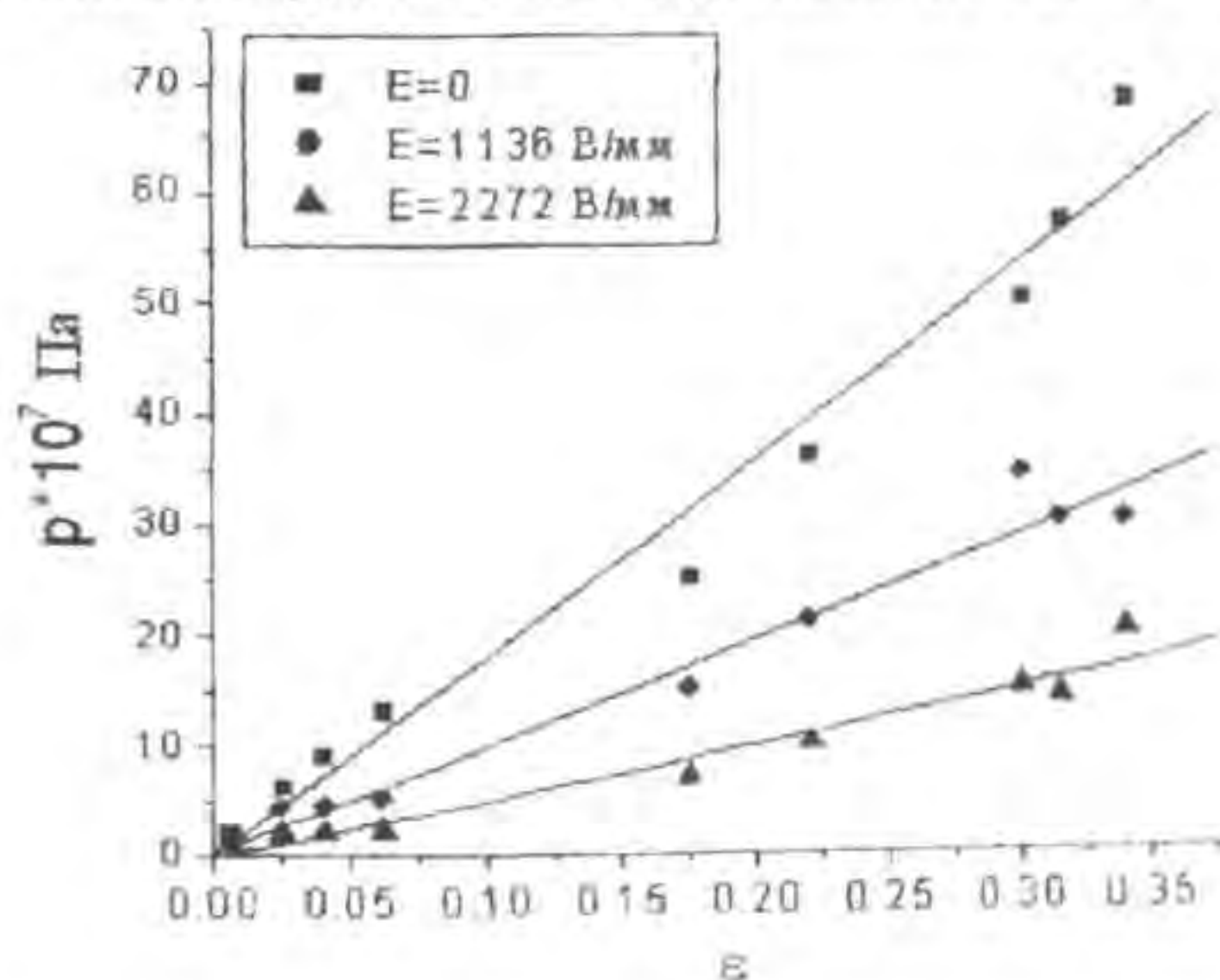


Рис. 2. Залежність відносного стискання ϵ плівок фторопласту від тиску p та напруженості електричного поля E

На рис. 2 наведені залежності відносного стискання ϵ від тиску p і напруженості електричного поля E через 15 хв. після накладання електричного поля (короткочасна повзучість).

На рис. 3 показано залежність довготривалої повзучості від напруженості E та тиску p . Із рис. 2, 3 видно, що зі зростанням напруженості поля збільшується повзучість фторопластових плівок. Це можна пояснити так. Коли плівка знаходиться у великих полях (максимальна напруженість рівна 2272 В/мм), то вона сильно поляризується і тоді може змінюватися конфігурація розташування атомів

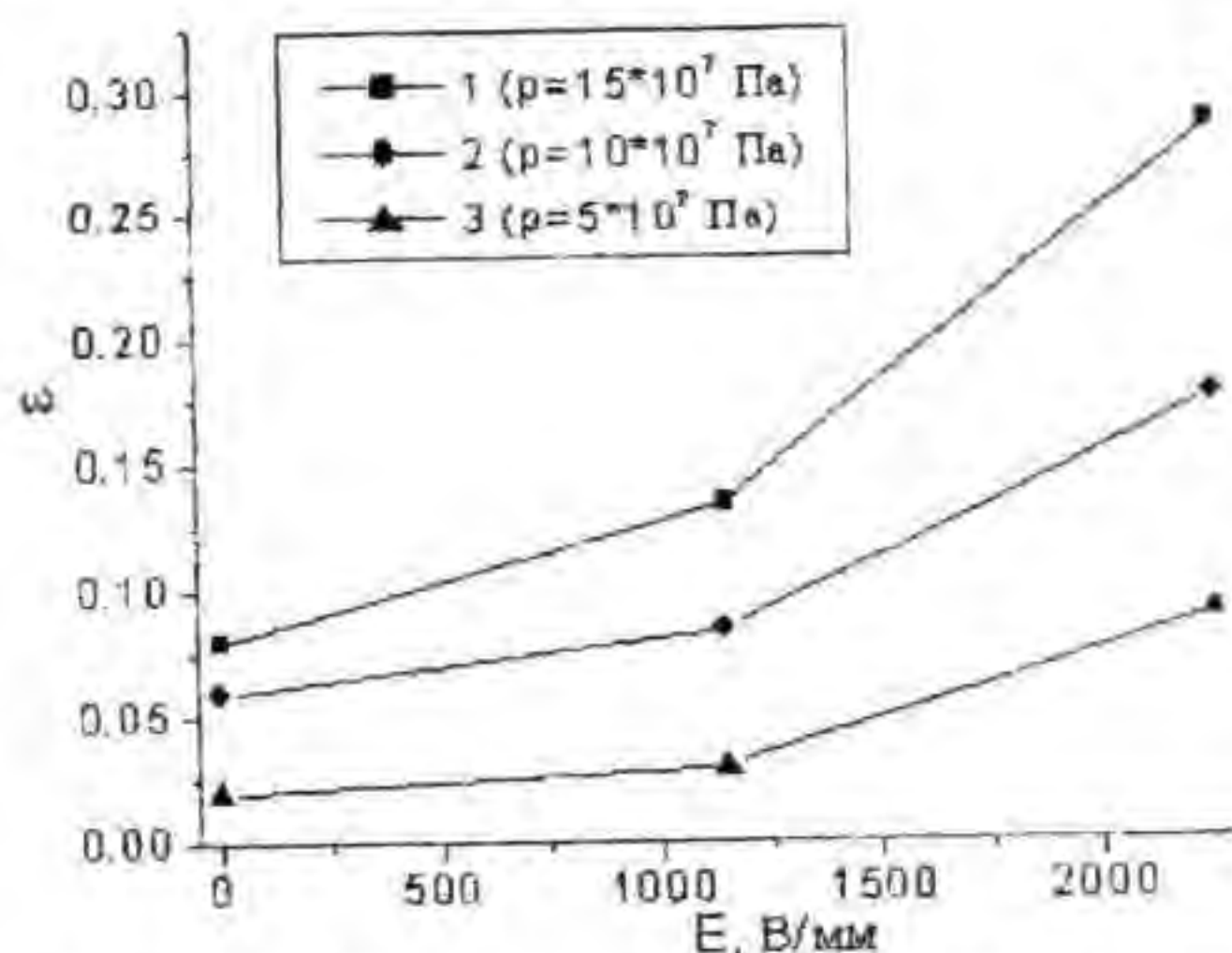


Рис. 3. Залежність відносного стискання ε плівок фторопласту від напруженості електричного поля E та тиску p

в просторі. При цьому може змінюватись сила міжатомного зв'язку. Напевно, вона зменшується, адже фторопласт після виготовлення плівки має розташування атомів, яке відповідає мінімальній енергії. А це спостерігається коли міжатомний зв'язок найсильніший. В поляризованому стані енергія одиниці об'єму фторопласту більша за енергію, коли фторопласт у рівноважному стані, тому можна говорити про послаблення міжатомних зв'язків в поляризованому стані. По цій причині спостерігається підвищення повзучості, коли плівка знаходиться в електричному полі. Повзучість могла б також підвищитись, якби через плівку проходив великий електричний струм. Проте струм практично нульовий до миті, коли починається пробій електричного зазору.

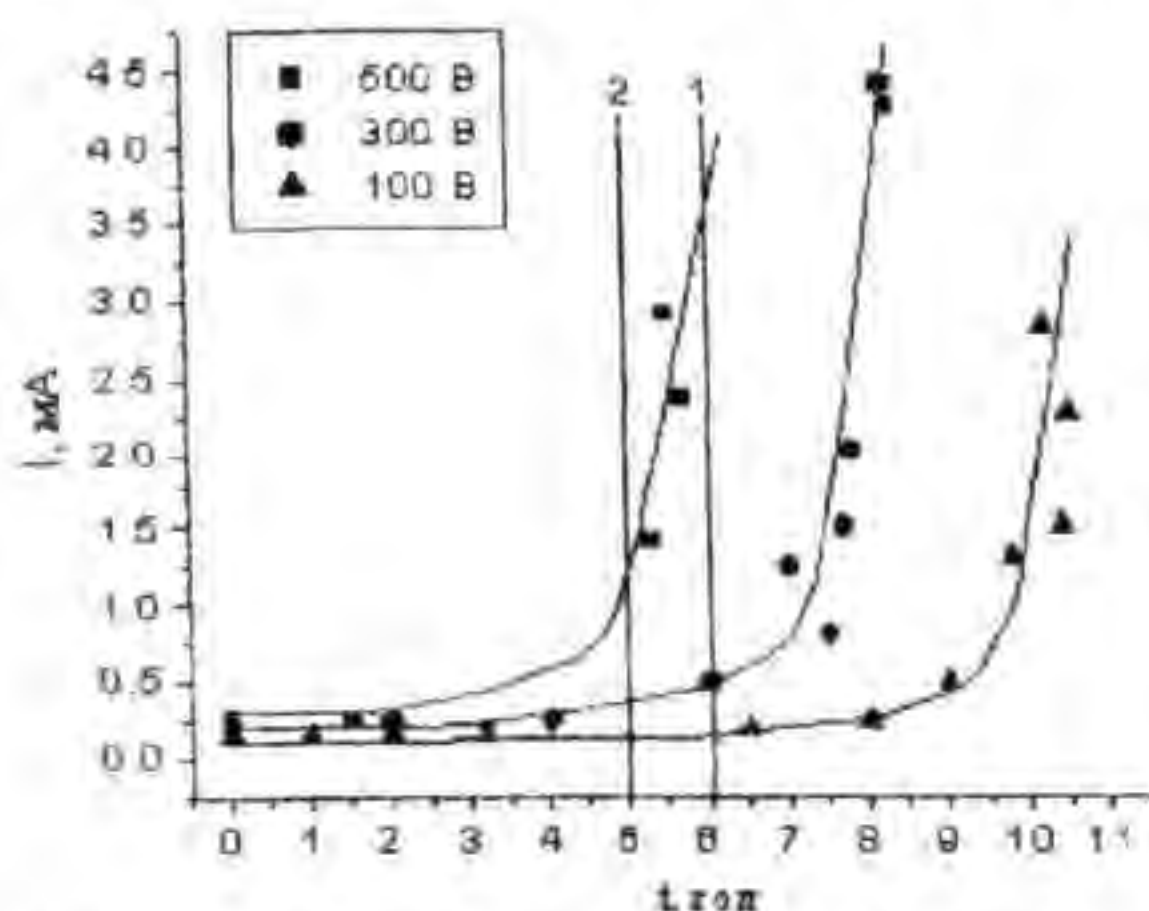


Рис. 4. Залежність струму I через фторопластову плівку від часу t при різних напругах на плівці

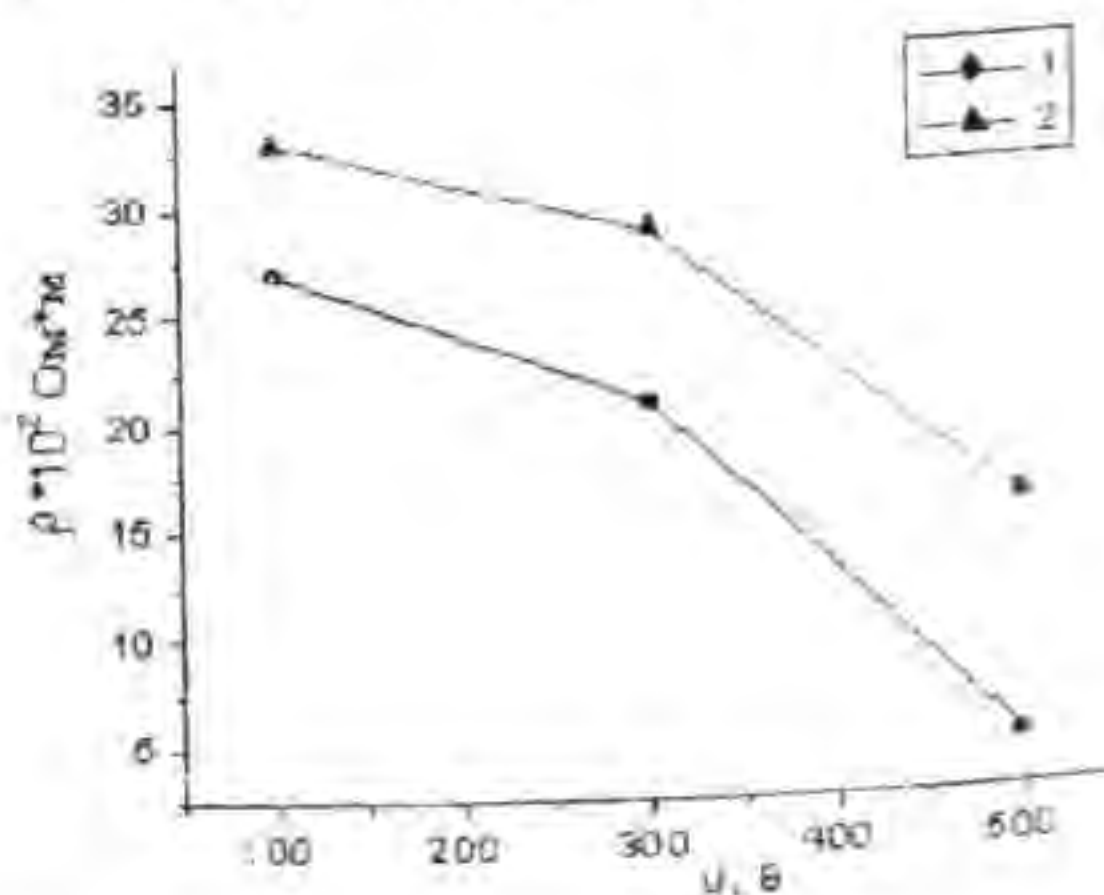


Рис. 5. Залежність питомого електроопору ρ фторопластової плівки від напруги U

На рис. 4 наведено залежності струму через плівку фторопласту від часу при напругах на плівці 500 В, 300 В, 100 В. Видно, що довгий час плівка не проводить електричного струму. Починаючи з деякого часу, в ній виникають дефекти, що порушують ізоляційні властивості, і плівка починає проводити електричний струм. Цей критичний час тим більший, чим менша напруженість електричного поля. При напрузі 500 В критичний час рівний двом годинам, а при напрузі 100 В - дев'яти годинам.

Залежність питомого електроопору в стані, коли плівка починає проводити електрику, наведено на рис. 5. Криві 1 та 2 знайдені по перерізах лініями 1 та 2 кривих рисунка 4. При $t = 6$ год (крива 1) питомий електроопір менший, ніж при $t = 5$ год (крива 2). Зі зростанням напруженості питомий електроопір спадає.

Висновки

1. В зазорах між електропровідними сферичними частинками модельного зразка КМ фторопласт-сталь повзучість фторопласту здійснюється при напругах $(10 - 70) \cdot 10^7$ Па, що в $(10 - 50)$ разів перевищують напругу повзучості вільних плівок.
2. Електричне поле в зазорі спричиняє поляризацію фторопласту, внаслідок чого зменшується повзучість. Це свідчить про те, що наслідком поляризації є ослаблення міжатомних сил.
3. Питомий електроопір фторопласту в зазорі спадає зі збільшенням часу навантаження та різниці потенціалу на зазорі. Це пояснюється утворенням електропровідних дефектів будови фторопласту.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Месяц Г.А. Эктоны в вакуумном разряде: пробой, искра, дуга. – М.: Наука, 2000.
2. Месяц Г.А. Эктонный механизм пробоя твердых диэлектриков // ДАН. – 2004. – том 399, №6 – с. 757-759.
3. Богомольный В.М. Электродинамический метод оценки энергии поверхностного разрушения диэлектриков, контактирующих с металлом // Измерительная техника. – 2004. – №10 – с. 52-56.
4. Пробой диэлектриков и полупроводников: Межвуз. науч.- тематич. сборник / Под ред. А.З. Эфендиява. – Махачкала, ДГУ, 1980.
5. Сканава Г.И. Физика диэлектриков (область слабых полей). – М.-Л.: Гос. изд. техн.-теор. лит., тип. им. Евгении Соколовой, 1949.
6. Сканава Г.И. Физика диэлектриков (область сильных полей). – М.: Гос. изд. физ.-мат. лит., 1958.

Надійшла до редколегії 23.12.2005

УДК: 539.171

Леонід Булавін, Кирило Чалий

Вплив просторової обмеженості на самодифузію молекул води в пористому склі

На основі гіпотези скейлінгу для просторово обмежених систем досліджений коефіцієнт самодифузії однокомпонентної рідини в циліндричних порах. Проведене порівняння отриманих теоретичних результатів з експериментальними даними залежності коефіцієнту самодифузії води від радіусу пори. Отримані результати демонструють якісну, а за певними припущеннями також і кількісну, узгодженість теорії та експерименту.

Ключові слова: просторово обмежені рідини, коефіцієнт самодифузії.

E-mail: kirchal@univ.kiev.ua

Leonid Bulavin, Kyrylo Chalyy

Influence of finite size effect on selfdiffusion of water molecules in porous glass

The finite-size scaling theory was used to study the self-diffusion coefficient of a pure liquid confined in cylindrical pores. Comparison of theoretical results and experimental data concerning the dependence of the water self-diffusion coefficient on the porous radius was examined. The obtained results demonstrate a qualitative and, under certain conditions, also a quantitative agreement between theory and experiment.

Keywords: confined liquids, self-diffusion coefficient.

Створення скейлінгової теорії просторово обмежених систем [1-3] дозволяє на якісному та кількісному рівні досліджувати особливості рівноважних і нерівноважних властивостей мезомасштабних рідин. Такі дослідження, як показано в [4], мають не тільки теоретичний, але і практичний інтерес. Зокрема, було з'ясовано, що вивчення ширини квазіупругого піку розсіяння повільних нейтронів у водних суспензіях плазматичних мембран нормальних та патологічних клітин дозволяє створити новий діагностичний метод для раннього виявлення онкологічних новоутворень. В основу цього методу покладена ідея про вплив процесу проліферації (зростання розміру клітин та їх окремих складових, в тому числі плазматичних мембран, в процесі онкологічного переродження) на поведінку коефіцієнта самодифузії D молекул води.

Експериментальними підтвердженнями залежності коефіцієнта самодифузії D від лінійних розмірів мезоскопічних систем (наприклад, товщини H біологічних мембран, радіусу R циліндричних пор тощо) можуть слугувати нейтронні дослідження [5,6]. Головним результатом цих досліджень є зростання коефіцієнта самодифузії D молекул води у пористому склі із збільшенням середнього радіусу R пор.

В даній роботі буде отримане теоретичне пояснення розмірної залежності $D(R)$ на основі гіпотези скейлінгу для просторово обмежених рідинних систем, яка була сформульована в [7].

Теоретичні підходи до дифузійних явищ у конденсованих середовищах, які спираються на термодинаміку і статистичну фізику необоротних процесів, дають наступний результат для коефіцієнта самодифузії однокомпонентних рідин (див., наприклад, [8,9]):

$$D = L_{11}(\partial\mu/\partial\rho)_T, \quad (1)$$

де L_{11} - кінетичний коефіцієнт Онзагера, який у лінійному законі для потоку частинок відповідає за прямий дифузійний процес, μ - хімічний потенціал, ρ - густина рідини.

Зауважимо, що існує принциповий тест на справедливість тієї чи іншої теоретичної формули для коефіцієнту самодифузії в конденсованому середовищі, зокрема в рідинній системі. Цей тест базується на відомому результаті (див., наприклад, [10]): в критичній точці коефіцієнт самодифузії стає рівним нулю, якщо не враховуються ефекти просторово-часової дисперсії ($q, \omega \rightarrow 0$). Умова $D(q, \omega \rightarrow 0) = 0$ ні в якому разі не означає припинення теплового молекулярного руху при досягненні критичного стану – молекули, звичайно, нічого „не знають” про цей стан. Разом з тим, з наближенням до критичних точок і точок фазових переходів 2-го роду повинен різко сповільнитися макроскопічний перенос маси, тепла тощо. Вираз (1) задовольняє вказаному тесту, оскільки $(\partial\mu/\partial\rho)_T$ є обернене значення ізотермічної стисливості β_T^{-1} рідини, яке за визначенням дорівнює нулю в критичній точці.

Відомо, що в загальному випадку кінетичний коефіцієнт Онзагера, який визначається парною просторово-часовою кореляційною функцією потоків частинок, складається з двох доданків

$$L_{11} = L_R + L_S, \quad (2)$$

де L_R - регулярна частина, що практично не залежить від близькості рідинної системи до критичної точки, а L_S - сингулярна частина, що залежить від взаємодії між флуктуаціями параметра порядку (флуктуаціями густини), яка аномально зростає з наближенням до критичної точки в об'ємній фазі.

Коефіцієнт самодифузії рідин у великих об'ємах. Спочатку дослідимо поведінку коефіцієнту самодифузії для відносно великих рідинних об'ємів, коли їх лінійні розміри L значно перевищують радіус кореляції ξ флуктуацій густини ($L \gg \xi$). В цьому випадку теорія динамічного скейлінгу [11,12] дає наступний результат для сингулярної частини L_S кінетичного коефіцієнту Онзагера:

$$L_S = \tau^{-\nu} f_1(\Delta\rho / \tau^\beta), \quad (3)$$

де $\tau = (T - T_c) / T_c$ - температурна змінна, відрахована від критичної температури об'ємної рідинної фази, $\nu \approx 0,63$ - критичний індекс, а $f_1(x)$ - масштабна функція радіусу кореляції флуктуацій густини, яка залежить від аргументу $x = \Delta\rho / \tau^\beta$, $\Delta\rho = (\rho - \rho_c) / \rho_c$ - параметр порядку рідинної системи (відхилення густини від критичного значення), $\beta \approx 1/3$ - критичний індекс. Масштабна функція $f(x)$ має такі асимптотики:

$$f_1(x \rightarrow 0) = \text{const}, \quad f_1(x \rightarrow \infty) \propto x^{-\nu/\beta}. \quad (4)$$

Що стосується другого множника $(\partial\mu / \partial\rho)_T$ у формулі (1), то він, очевидно, повністю характеризується сингулярною поведінкою ізотермічної стисливості β_T^{-1} . У флуктуаційній теорії фазових переходів і критичних явищ [12-14] для оберненого значення ізотермічної стисливості маємо

$$\beta_T^{-1} = \tau^\gamma f_2(x), \quad (5)$$

де γ - критичний індекс, який приймає числове значення $\gamma \approx 1,24$ для рідинних систем, а масштабна функція $f_2(x)$ характеризується такими асимптотиками: (а) $f_2(x) = \text{const}$ в околі критичної ізохори; (б) $f_2(x) \propto x^{1/\beta}$ в околі критичної ізотерми.

Таким чином, загальна формула для коефіцієнту самодифузії довільної однокомпонентної системи (рідини, газу, твердого тіла) в широкому околі точок фазових переходів 2-го роду і критичних точок має такий вигляд:

$$D = [L_R + \tau^{-\nu} f_1(x)] \tau^\gamma f_2(x), \quad (6)$$

де масштабний аргумент $x = \varphi / \tau^\beta$, а φ - параметр порядку системи, яка досліджується.

Надалі слід розрізнити три області зміни термодинамічних змінних:

1. *Флуктуаційна область*, яка знаходиться у асимптотичній близькості до точок фазових переходів другого роду та критичних точок. В цій області сингулярні внески, подібні до сингулярної частини кінетичного коефіцієнту Онсагера, набагато переважають регулярні частини ($L_R \ll L_S$). З наведених вище формул (1)-(6) легко побачити, що коефіцієнт самодифузії D у флуктуаційній області має таку температурну залежність:

$$D = \tau^{\gamma-\nu} f_3(x), \quad (7)$$

де масштабна функція $f_3(x) = f_1(x)f_2(x)$.

Для більш точного визначення флуктуаційної області в роботі [15] була введена відповідна температура τ_D - так звана температура динамічного кросоверу. Тоді флуктуаційну область можна визначити за

допомогою нерівності $\tau \ll \tau_D$. Числові оцінки показують, що для класичних рідин температура динамічного кросоверу має порядок $\tau_D \approx 10^{-4} \div 10^{-5}$ і, таким чином, ця температура стає практично досяжною лише в окремих експериментах з рідинними системами при достатньо близьких підходах до їх критичних точок.

Як зазначалося вище, обертання коефіцієнту самодифузії в нуль, яке у відповідності до формули (7) відбувається за степеневими законами наступного вигляду:

а) в околі критичної ізохори $\Delta\rho \ll \tau^\beta$ („слабкі” зовнішні поля $h \ll \tau^{\beta\delta}$)

$$D \propto \tau^{\gamma-\nu}, \quad \gamma-\nu \approx 0,6; \quad (8)$$

б) в околі критичної ізотери $\Delta\rho \gg \tau^\beta$ („сильні” зовнішні поля $h \gg \tau^{\beta\delta}$)

$$D \propto \Delta\rho^{(\gamma-\nu)/\beta} \propto h^{(\gamma-\nu)/\beta\delta}, (\gamma-\nu)/\beta \approx 1,9, (\gamma-\nu)/\beta\delta \approx 0,4, \quad (9)$$

в реальності не повинно мати місце, оскільки наведені вище вирази для коефіцієнту самодифузії не враховують ефекти просторово-часової дисперсії (іншими словами, вплив просторової нелокальності та пам'яті), які обов'язково треба приймати до уваги поблизу критичної точки та точок фазових переходів 2-го роду.

2. *Широкий окіл критичної точки*, в якому регулярні та сингулярні внески до кінетичних коефіцієнтів мають приблизно одноковий порядок, тобто $L_R \approx L_S$. Більш точно ця область визначається нерівністю $\tau_D < \tau < \tau_1$, де значення температурного відхилення τ_1 може досягати значень $\tau_1 \approx (0,5 \div 1)$. Очевидно, що для цієї області коефіцієнт самодифузії має таку температурну залежність:

$$D = \tau^\gamma f_A(x). \quad (10)$$

Важливо підкреслити, що область, яка визначається нерівністю $\tau_D < \tau < \tau_1$, включає в себе досить широкий інтервал температур навколо критичної точки, які можуть бути на сотні градусів більше (або менше), ніж критична температура T_c для таких рідин як вода, бензол, пентан тощо. Саме ця температурна область і становить безпосередній експериментальний і теоретичний інтерес у зв'язку з тією проблемою, яка розглядається в даній роботі.

3. *Регулярна область $\tau > \tau_1$* . В цій області, як легко зрозуміти, регулярні внески в кінетичні коефіцієнти набагато переважають сингулярні внески. При $\tau \geq 1$, звичайно, немає ніякого сенсу враховувати критичні аномалії, а похідні типу $(\partial\mu/\partial\rho)_T$ слід визначати із рівнянь стану типу рівняння Тейта або інших регулярних рівнянь, які не беруть до уваги флуктуаційні ефекти.

Ще одне зауваження стосується опису фізичних властивостей конденсованих середовищ в широкому околі критичних точок з точки зору

загальної проблеми кросоверу (переходу) від області $\tau < \tau_1$, де ще слід враховувати скейлінгові закони, до регулярної області $\tau > \tau_1$, де будь-які скейлінгові поправки можна вже не враховувати. Іншими словами, питання полягає в тому, де слід очікувати розташування температури τ_1 . Відповідь на це питання вимагає знання числа Гінзбурга $Gi = \langle \Delta\varphi^2 \rangle / \varphi_0^2$, де $\langle \Delta\varphi^2 \rangle$ - середньо-квадратична флуктуація параметра порядку, а φ_0 - рівноважне значення параметра порядку [16,17]. Якщо число Гінзбурга $Gi \ll 1$, то в температурній області $0 < \tau < Gi$ необхідно враховувати флуктуаційні ефекти за скейлінговою теорією або ренормалізаційно-груповим підходом, а в області $Gi < \tau < \tau_1 < 1$ флуктуаційними ефектами можна нехтувати і вести опис фізичних властивостей за допомогою теорії середнього поля Ландау. Проте, оцінки числа Гінзбурга для більшості класичних рідин показують, що для них $Gi \geq 1$ (див., наприклад, [18,19]. Це означає, що для рідинних систем в усій критичній області $0 < \tau < \tau_1 \cong 1$ слід враховувати флуктуаційні ефекти, а в некритичній області, де $\tau > 1$, відбувається кросовер до регулярного опису фізичних властивостей рідин.

Коефіцієнт самодифузії рідин у малих об'ємах. Перейдемо тепер до розгляду коефіцієнта самодифузії у малих об'ємах з лінійними розмірами L , які мають однаковий порядок або навіть менші за радіус кореляції ξ флуктуацій густини ($L \leq \xi$). З цією метою слід скористатися гіпотезою скейлінгу для просторово обмежених рідин [7] (див. також [1-3]), у відповідності з якою маємо такі співвідношення для радіусу кореляції ξ та ізотермічної стисливості β_T :

$$\xi = L F_1(u, v), \quad (11)$$

$$\beta_T = L^{-\gamma/\nu} F_2(u, v). \quad (12)$$

У формулах (11), (12) аргументи масштабних функцій $u = aL^{1/\nu}$ і $v = b\Delta\rho L^{\beta/\nu} = chL^{\beta/\nu}$ є по суті відношеннями лінійного розміру обмеженої рідинної системи до радіусів кореляції флуктуацій густини об'ємної фази $\xi = \xi_0 \tau^{-\nu}$ в околі критичної ізохори (або „слабкому” зовнішньому полі $\tau \gg h^{1/\beta}$) та $\xi = \xi_0 \Delta\rho^{-\nu/\beta} = \xi_0 h^{-\nu/\beta}$ в околі критичної ізотерми (або в „сильному” зовнішньому полі $\tau \ll h^{1/\beta}$).

З формул (1), (11) і (12) маємо наступну загальну формулу для коефіцієнту самодифузії однокомпонентної рідинної системи:

$$D = [L_R + L F_1(u, v)] L^{-\gamma/\nu} F_2(u, v), \quad (13)$$

яка для флуктуаційної області $\tau \ll \tau_D$ у асимптотично близькому околі критичної точки, де $L_R \ll L_S$, дає

$$D = L^{-\gamma/\nu} F_3(u, v), \quad (14)$$

причому $F_3(u, v) = F_1(u, v)F_2(u, v)$. Звідси для граничних підходів до критичної точки маємо:

а) в околі критичної ізохори $\tau \gg \Delta\rho^{1/\beta}$ („слабкі” зовнішні поля $\tau \gg h^{1/\beta\delta}$)

$$D = \tau^{\gamma-\nu} F_4(u, v), \quad (15)$$

б) в околі критичної ізотерми $\tau \ll \Delta\rho^{1/\beta}$ („сильні” зовнішні поля $\tau \ll h^{1/\beta\delta}$)

$$D = \Delta\rho^{(\gamma-\nu)/\beta} F_5(u, v), \quad (16)$$

де показники степеневих законів дорівнюють $\gamma - \nu \approx 0,61$ і $(\gamma - \nu)/\beta \approx 1,85$.

Підстановка формул (11), (12) у вираз (1) дає наступний результат для коефіцієнту самодифузії D у просторово обмеженій рідині в широкому околі критичної точки, який визначається нерівністю $\tau_D < \tau < \tau_1$:

$$D = L^{-\gamma/\nu} F_6(u, v), \quad (17)$$

де масштабна функція $F_6(u, v) \approx 2L_R F_2(u, v)$, з якої випливають такі частинні випадки

а) в околі критичної ізохори $\tau \gg \Delta\rho^{1/\beta}$ („слабкі” зовнішні поля $\tau \gg h^{1/\beta\delta}$)

$$D = \tau^\gamma F_7(u, v), \quad (18)$$

б) в околі критичної ізотерми $\tau \ll \Delta\rho^{1/\beta}$ („сильні” зовнішні поля $\tau \ll h^{1/\beta\delta}$)

$$D = \Delta\rho^{\gamma/\beta} F_8(u, v). \quad (19)$$

Врахування ефектів просторової (часової) дисперсії, як вже зазначалося, робить коефіцієнт самодифузії скінченим в самій критичній точці. Раніше в роботі [20] був розвинений метод врахування ефектів просторової та часової дисперсії, суть якого можна сформулювати наступним чином: 1) якщо фізична величина є сингулярною (аномально зростає) в критичній точці, то дисперсійні поправки, що залежать від хвильового вектора q або частоти ω , слід додавати до обернених значень подібних величин (прикладом можуть слугувати такі величини, як ізотермічна стисливість β_T , теплоємності C_P або C_V тощо); 2) якщо фізична величина прямує до нуля в критичній точці (прикладом подібних величин є саме коефіцієнт самодифузії, швидкість звуку тощо), то дисперсійні поправки додаються до самих таких величин. Іншими словами, поправки на ефекти просторової дисперсії, пропорційні добутку ξq (у великих об'ємах) або Lq (у малих об'ємах), слід додавати у формули для коефіцієнту самодифузії як до 1) оберненого значення сингулярної частини кінетичного коефіцієнту L_S^{-1} , так і до 2) оберненого значення ізотермічної стисливості, тобто похідної $(\partial\mu/\partial\rho)_T$.

Порівняння теорії з експериментом. Для теоретичного пояснення експериментальних даних [5,6] щодо коефіцієнту самодифузії води в пористому склі скористаємося отриманими вище результатами, а саме:

1) формулою (10) для температурної залежності коефіцієнту самодифузії D в об'ємній фазі, яку можна записати для «слабких» зовнішніх полів у вигляді

$$D = D_0 \tau^\gamma, \quad (20)$$

де D_0 - амплітуда коефіцієнту самодифузії, яка співпадає зі значенням D_R цього коефіцієнту в регулярній області $\tau \geq 1$ далеко від критичної точки. Як показують експериментальні дані [4], коефіцієнт самодифузії води у порах з радіусом понад 150 нм вже досягає об'ємного значення $D \approx 2,3 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$;

2) формулою (18) для широкого околу критичної точки у випадку просторово обмеженої однокомпонентної рідини, яка має такий еквівалентний вигляд:

$$D(R) = D_0 [\tau(R)]^\gamma, \quad (21)$$

де $\tau(R) = [T - T_c(R)] / T_c(R)$ - відхилення температури T досліджуваної системи від нового значення «критичної температури» $T_c(R)$ у просторово обмеженій рідині. Оскільки у системі з обмеженою в усіх напрямках геометрією радіус кореляції не може перевищувати лінійні розміри зразка при досягненні точки фазового переходу 2-го роду або критичної точки, то по суті нова «критична температура» $T_c(R)$ - це та температура, при якій певна фізична властивість досягає свого екстремального, але скінченного, значення;

3) формулою для нової «критичної температури» $T_c(R)$ у просторово обмеженій системі з циліндричною геометрією [21]

$$T_c(R) = T_c [1 + (\mu_1 \xi_0 / R)^{1/\nu}]^{-1}, \quad (22)$$

де T_c - критична температура системи у великому об'ємі ($L \gg \xi$), $\mu_1 = 2,4048$ - перший нуль функції Беселя $J_0(z)$, ξ_0 - амплітуда радіуса кореляції, R - радіус циліндричної пори. Як видно з формули (22), із зменшенням R нова «критична температура» $T_c(R)$ стає все меншою порівняно з критичною температурою T_c об'ємної фази;

4) наступною формулою для співвідношення між температурними змінними $\tau(R)$ у просторово обмеженій системі з циліндричною геометрією та $\tau = (T - T_c) / T_c$ у тій же системі, але яка вже знаходиться у великому об'ємі:

$$\tau(R) = \tau + (\mu_1 \xi_0 / R)^{1/\nu} (1 + \tau). \quad (23)$$

Зазначимо, що співвідношення між температурними змінними τ і $\tau(R)$ залежить від того, де знаходиться просторово обмежена система по своїй температурі T – у докритичній ($T < T_c$) чи закритичній ($T > T_c$) областях. У першому випадку докритичної області, тобто коли система у малому об'ємі знаходиться ближче до критичної точки, ніж в об'ємній фазі, маємо $|\tau(R)| < |\tau|$. У другому випадку закритичної області ситуація змінюється на протилежну: $|\tau(R)| > |\tau|$, тобто обмежена система віддаляється від критичної точки із зменшенням її лінійного розміру (радіусу R циліндричної пори чи ширини H плоского прошарку).

Перейдемо безпосередньо до порівняння теорії, яка розроблена в цій роботі, з експериментом по самодифузії води у пористому склі [5,6]. Експериментальні дані [5] були отримані при кімнатній температурі $T=293$ К. Оскільки критична температура для H_2O становить $T_c=647$ К, то температурна змінна $\tau = (T - T_c) / T_c = -0,547$. Що стосується температурної змінної $\tau(R)$, то її значення, як випливає з формули (23), залежить від радіусу R пори, температурної змінної τ та амплітуди радіусу кореляції ξ_0 , що становить 0,16 нм [22].

Тоді на підставі виразу (20) для коефіцієнту дифузії D в об'ємній фазі, тобто при радіусі пор $R \geq 150$ нм, і при температурному відхиленні $\tau = -0,547$, виразу (21) для коефіцієнту дифузії $D(R)$ для просторово обмеженої системи з циліндричною геометрією пор та з урахуванням (23) маємо наступне значення коефіцієнту самодифузії води, яка заповнює пористе середовище:

$$D(R) = D \left[1 + \left(p \frac{\mu_1 \xi_0}{R} \right)^{1/\nu} \left(1 + \frac{1}{\tau} \right) \right]^\tau, \quad (24)$$

де p – параметр, що може варіюватися для врахування ступеня неупорядкованості пор. В випадку модельної системи з однаковими за формою та розмірами паралельними циліндричними порами значення $p=1$. В разі використання (24) для порівняння з експериментальними даними [5] було знайдено оптимальне значення параметра неупорядкованості пор $p=62$. Результати порівняння експериментальних даних [5] та результатів розрахунків за формулою (24) наведені в таблиці:

R , нм	62,5	88,0	117,0	130,0	$\geq 150,0$
$D_{\text{експ}} \cdot 10^{-5}$, см ² /с	1,59	1,95	2,13	2,19	2,30
$D_{\text{теор}} \cdot 10^{-5}$, см ² /с	1,79	2,00	2,11	2,14	2,17

Отримані результати демонструють якісну, а також і кількісну (з відхиленням в середньому на 4,8 %) узгодженість теорії та експерименту.

Можна запропонувати ще один підхід до порівняння теорії з експериментом [5] по самодифузії води у пористому склі, який базується на розрахунках нової «критичної температури» $T_c(R)$ для H_2O в циліндричних порах, отриманих в результаті комп'ютерного моделювання методами Монте-Карло і молекулярної динаміки, а також у незначній кількості прямих експериментальних досліджень (див. огляд [22]). Комп'ютерне моделювання підтвердило, що для води в циліндричних порах з радіусом $R > 3$ нм зсув критичної температури $\Delta T_c = T_c - T_c(R)$ описується скейлінговим співвідношенням: $\Delta T_c \propto R^\theta$, де критичний індекс $\theta = 1/0,63 = 1,587$. Саме це значення для розмірної залежності критичної температури $T_c(R)$ було використане нами вище у теоретичних розрахунках. Що стосується експериментальних досліджень, то в роботах [23-25] для циліндричних пор з радіусом 3,9 нм, який практично співпадає з мінімальним радіусом пор 4 нм роботи [5], було отримане таке значення зсуву критичної температури: $T_c - T_c(R) = 0,11 T_c(R)$. Цей результат відповідає «критичній температурі» $T_c(R) = 583$ К, тобто $\tau(R) = -0,497$, для води в подібних циліндричних порах. Підстановка отриманого значення температурної змінної $\tau(R)$ в (21) разом з формулою (20) дає для відношення коефіцієнтів самодифузії $[\frac{D}{D(R)}]_{теор} = 1,13$, що майже в 2 рази менше експериментального значення цього відношення.

Суттєва розбіжність отриманих значень величини $[\frac{D}{D(R)}]_{теор}$ пояснюється, можливо, такими обставинами: (1) достатньо гарне кількісне співпадіння теоретичних і експериментальних значень при використанні першого методу забезпечено підбором параметру неупорядкованості пор p ; (2) другий метод дозволяє лише наближено оцінити значення критичної температури $T_c(R)$ в пористому склі, оскільки значення $T_c(R)$ знаходилися в [23-25] методом візуального спостереження різкого зменшення нахилу ізотерми адсорбції.

На закінчення зазначимо, що проведені дослідження надає додаткове обґрунтування розвинутому теоретичному підходу та практичним рекомендаціям роботи [4] щодо використання нового методу ранньої діагностики онкологічних захворювань. Цей метод базується саме на вивченні коефіцієнту самодифузії молекул води, який визначає ширину квазіупругого піку розсіяння повільних нейтронів у водних суспензіях плазматичних мембран ракових клітин.

Автори вдячні професору О.В. Чалому за корисні поради та критичні зауваження.

Література

1. Fisher M.E. // Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi" / Ed. M.S. Green. –V. 51. –New York: Academic, 1971.
2. Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems / Ed. V. Privman. –Singapore: World Scientific, 1990.
3. Binder K. // Annu. Rev. Phys. Chem., -1992, -V. 43, -P. 33-59.
4. Булавін Л.А., Вишневський І.М., Чехун В.Ф., Біла Р.В., Триндяк В.П., Чалий К.О. // Доповіді НАН України, -2004, № 7, -С. 176-181.
5. Булавин Л.А. // Физ. Жидк. Сост., -1992, -Т. 20, -С. 124-129.
6. Булавін Л.А., Кармазина Т.В., Клепо В.В., Слісенко В.І. Нейтронна спектроскопія конденсованих середовищ. –К.: Академперіодика, 2005.
7. Чалий О.В., Лукомський В.П., Ганжа І.С., Цехмістер Я.В., Чалий К.О. Нелінійні процеси в фізиці: колювання, хвилі, самоорганізація. –К.: Четверта хвиля, 2005.
8. Де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. –М.: Мир, 1964.
9. Чалый А.В. Неравновесные процессы в физике и биологии. –К.: Наукова думка, 1997.
10. Леонтович М.А. Статистическая физика. –М.: Гостехиздат, 1944.
11. Hohenberg P.C., Halperin B.I. // Rev. Mod. Phys., -1977, -V.49, -P. 435.
12. Анисимов М.А. Критические явления в жидкостях и жидких кристаллах. – М.: Наука, 1987.
13. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. –М.: Наука, 1982.
14. Булавін Л.А. Критичні властивості рідин. –К.: АСМІ, 2002.
15. Onuki A. // J. Chem. Phys. –1986, –V. 85, –P. 1122-1125.
16. Гинзбург В.Л. // ФТТ, -1960, -Т. 2, -С. 20-31.
17. Леванюк А.П. // ЖЭТФ, -1959, -Т. 36, -С. 810.
18. Бойко В.Г., Могель Х.Й., Сысоев В.М., Чалый А.В. // УФН, -1991, -Т. 161, -С. 77.
19. Альохін О., Рудніков Є. // ЖФД, -2004, -Т. 8, № 2, -С. 103-121.
20. Сысоев В.М., Чалый А.В. // ТМФ, -1974, -Т. 18, -С. 283.
21. Чалий О.В., Цехмістер Я.В., Чалий К.О. Процеси впорядкування та самоорганізації у флуктуаційних моделях відкритих систем. –К.: Віпол, 2001.
22. Brovchenko I., Oleinikova A. // Handbook Theor. Comput. Nanotechnology, -2005, –V. 62, -P. 1-98.
23. Morishige K., Fujii H., Uga M., Kinukawa D. // Langmuir, -1997, –V. 13, -P. 3494.
24. Morishige K., Shikimi M. // J. Chem. Phys, -1998, –V. 108, -P.7821.
25. Morishige K., Ito M. // J. Chem. Phys, -2002, –V. 117, -P.8036.

Надійшла до редакції 26.12.2005

УДК 618.785.556

Ващенко В.М.*, Лоза Є.А.[∞],
Патлашенко Ж.І., Банніков О.О.,
Черниш О.Є.

Чисельний метод абераційного розрахунку монохроматорів Ч.2

В роботі розглядаються результати застосування удосконаленої абераційної теорії на прикладі схеми одинарного монохроматора на базі сферичної дифракційної ґратки. Викладається чисельний метод мінімізації аберацій і побудови абераційних спектральних зображень вхідної щілини; кількісно оцінюється рівень розсіяного випромінювання. В результаті отримано оптимізуючі поправки для головних параметрів монохроматора.

Ключові слова: дифракційний монохроматор, абераційний розрахунок, спектральне зображення, мінімізація аберацій.

*E-mail: Daniilko@mail.ru

Vaschenko V.M.*, Loza E.A.[∞],
Patlashenko Jh.I., Bannikov O.O.,
Chernysh O.E.

The numerical method of monochromator aberrations calculation P.2

This work considers the results of advanced aberration theory for a scheme of single monochromator on the basis of spherical diffraction grating. A numerical method of aberrations minimization and aberration image plotting of entrance slit is proposed. The quantitative estimate of scattered light level is made. In conclusion corrections to main spectrometer parameters are obtained.

Key Words: diffraction monochromator, aberrations calculation, spectral image, aberrations minimization.

[∞]E-mail: LozaE@ukr.net

1. Вступ

В даній роботі на прикладі реальної схеми одинарного дифракційного монохроматора, зображеної на рис.1, досліджуються оптимізаційні можливості застосування запропонованого нами нового, вдосконаленого чисельного методу абераційних розрахунків дифракційних монохроматорів. Суть методу наведена в першій частині нашої роботи в даному збірнику.

До схеми монохроматора входять: сферична дифракційна ґратка з радіусом кривини $R=250$ мм, густиною штрихів – 600 мм^{-1} ; розміри заштрихованої поверхні – 40×36 мм; прямих вхідної та вихідної щілин однакової ширини $d=0.15$ мм та висоти $l=10$ мм. Вхідна щілина розташована на крузі Роуланда так, що кут па-

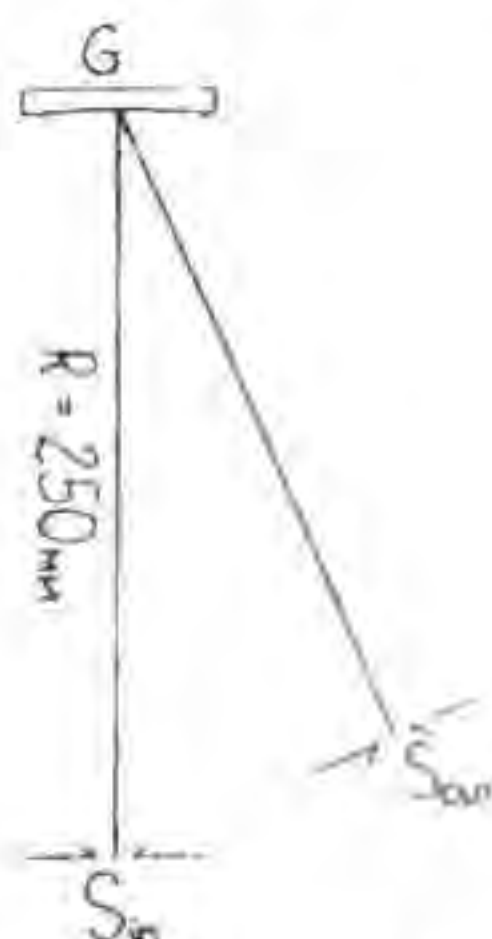


Рис.1. Оптична схема монохроматора. G – сферична дифракційна ґратка, S_{in} – вхідна щілина, S_{out} – вихідна щілина.

діння променя у площині дифракції на ґратку відносно нормалі до поверхні в точці падіння $\psi \rightarrow 0$. Задача оптимізації схеми полягає в уточненні її параметрів з метою забезпечення максимально-можливої якості зображення вхідної щілини у вихідній площині. Як і в попередній частині роботи введемо прямокутну декартову систему координат з початком відліку, розташованому у вершині дифракційної ґратки. Вісь x спрямована до центру вхідної щілини а вісь y спрямована вздовж центрального штриха ґратки. Штрихи на сферичній поверхні утворюються сукупністю рівновіддалених площин, паралельних площині XOZ . Метою даної роботи є дослідження вихідного спектрального зображення вхідної щілини, створюваного одинарним монохроматором і отримання поправочних параметрів для збільшення співвідношення сигнал/шум шляхом ітераційної оптимізаційної процедури.

2. Чисельна реалізація алгоритму

Для розрахунку будемо використовувати $N \geq 4000000$ променів, що поширюються в напрямі дифракційної ґратки, чого достатньо для рівномірного і досить щільного заповнення апертури вхідної щілини і ґратки, а отже і проявлення всіх деталей абераційного зображення. Використання більшої кількості променів вимагає значно більшого комп'ютерного часу оптимізації. Через N позначимо кількість променів що не пройшли через отвір вихідної щілини, які є розсіяним випромінюванням з точністю до сталого множника. Кількість променів, що пройшли через вихідну щілину позначимо N^+ . Відхилення променів за рахунок фізичних (абераційних) причин призводить до зменшення світлосили та збільшення кількості розсіяного в монохроматорі випромінювання. Відмітимо, що на відміну від класичного методу розроблений нами підхід дозволяє чисельно визначити кількісну величину розсіяного випромінювання, що є дуже важливим спектральним параметром, використовуваним для оптимізації схеми монохроматора. Будемо також розрізняти – кількість променів, що вийшли за межі вихідної щілини у напрямі перпендикулярно її довжини (N_x), тобто вздовж кривої переміщення щілини при зміні робочої довжини хвилі (в нашому випадку – пряма, дотична до круга Роуланда в меридіональній площині ґратки), і $N_y = N - N_x$. Достатньо очевидно, що промені, які потрапили в N_y , дають значно менший вклад в розсіяне випромінювання, оскільки для них можна встановити світлові пастки. Пастки класично виготовляються з сажі або чорного бархату. Ефективним також є застосування органічних барвників, які мають більший інтегральний показник поглинання в значному спектральному діапазоні, які, однак, менш стабільні до термічних та хімічних умов експлуатації приладу, таким же чином можна охарактеризувати і анодне оксидування поверхонь. Варто зауважити, що розрахунок схеми одинарного монохроматора вже достатньо для розробки

схеми симетричного подвійного монохроматора, хоча все ж і в такому випадку краще розглядати всю схему конкретного монохроматора разом.

За таких умов задача оптимізації монохроматора зводиться до мінімізації функціоналу аберацій

$$\Xi = N_x / N, \quad (1)$$

що чисельно визначатиме абераційні спотворення спектрального образу вхідної щілини. Взагалі кажучи, величина Ξ підсумовує всі абераційні параметри схеми в наближенні її фізичного аналізу, проведеного в даній роботі. Слід також зауважити, що вираз (1) не єдиним можливим функціоналом за допомогою якого можна проводити оптимізацію схеми, і вибір вигляду (1) диктується лінійністю чутливості фотоелектронного помножувача. Наприклад, якщо схема монохроматора розробляється для візуального спостереження зображення спектра, то Ξ буде визначатися як $\Xi = \ln(N_x) / \ln(N)$. Очевидно, що $\Xi = 0$, якщо немає променів, які виходять за межі ширини щілини по горизонталі. Тут може виникнути проблема, пов'язана з тим, що $\Xi = 0$ коли $N_x = 0$ (тобто може трапитися ситуація, коли всі промені вийшли за межі вихідної щілини вздовж осі y). Функціонал Ξ визначає кількість розсіяного випромінювання в монохроматорі і залежить від багатьох аргументів, що відповідають властивостям, формі і розташуванню оптичних елементів схеми. Якщо абераційне зображення вхідної щілини краще відповідає формі вихідної щілини величина Ξ буде зменшуватися, а в протилежному випадку - зростати. Іншими словами, збільшення світлосили та зниження рівня розсіяного випромінювання досягається за рахунок кращої відповідності між формою вихідної щілини та спектрального абераційного образу вхідної щілини. Це прямим чином впливає на співвідношення сигнал/шум, яке збільшується при зменшенні кількості розсіяного випромінювання та/або збільшенні світлосили. Виходячи з симетрії досліджуваної схеми кількість оптимізації параметрів можливо зменшити.

Оптимізацію для п'ятих довжин хвиль УФ діапазону: 250 нм, 275 нм, 300 нм, 325 нм та 350 нм в першому порядку спектра проведемо шляхом багатовимірної ітераційного методу найшвидшого спуску [1] зі змінним кроком за найбільш важливими параметрами схеми ϕ і ρ , де ϕ – кут під яким з центру круга Роуланда видно точку його дотику до вихідної площини, а $\rho \approx R/2$ – радіус круга Роуланда. Для нульових наближень відповідно до параметрів схеми отримаємо:

$$\rho = R/2 = 125 \text{ мм},$$

$$\phi = 2 \cdot \arcsin\left(\frac{n \cdot \bar{\lambda}}{e_0}\right) = 0.361973 \text{ рад},$$

де $\bar{\lambda} = 300$ нм – значення центральної довжини хвилі. Центр щілини в нульовому наближенні визначається, як "центр ваги" всіх точок перетину променів з вихідною площиною, що є досить точним для прямих щілин. В процесі оптимізації може виникнути деяка незручність, якщо нульове на-

ближення обрано невірно і кількість променів, що потрапляє до вихідної щілини замала менше 5-10% від вхідного потоку, оскільки в такому випадку вагомим стає вклад похибки, пов'язаної з дискретністю їх кількості. Під дискретністю в даному випадку слід розуміти дробовий шум величини N_x .

В результаті оптимізації отримаємо наступні поправки до цих величин:

$$\rho = R/2 - 0.0653 \text{ мм} = 124.9347 \text{ мм},$$
$$\phi = 2 \cdot \arcsin\left(\frac{n \cdot \bar{\lambda}}{e_0}\right) - 0.005358 \text{ рад} = 0.356615 \text{ рад}.$$

За рахунок отриманих поправок частка променів, що потрапляють до вихідної щілини, збільшується з 85.83% до 86.16%, а кількість розсіяного випромінювання при цьому зменшується на 2,3%. Це говорить про те, що нульове наближення вибрано досить вдало і подальша оптимізація не значно підвищує якість спектрального зображення. Якщо ж збільшити ширину вихідної щілини для максимально повного використання світлового потоку до $1,5 \cdot d$, то результати будуть наступні:

$$\rho = R/2 - 0.0663 \text{ мм} = 124.9337 \text{ мм},$$
$$\phi = 2 \cdot \arcsin\left(\frac{n \cdot \bar{\lambda}}{e_0}\right) - 0.006570 \text{ рад} = 0.355383 \text{ рад}.$$

При цьому частка променів, які потрапляють до вихідної щілини, збільшується з 99.47% до 99.49%, а рівень розсіяного випромінювання при цьому зменшується на 3,8%. Спектральна ширина вихідної щілини в цьому випадку складає 1,3 нм.

Оптимізація схеми в більш високих порядках вимагає використання параболічних щілин, оскільки кривиною спектрального зображення в цьому випадку вже неможливо знехтувати.

Чисельна методика оптимізації додатково ускладнюється скінченністю кількості променів, оскільки в даному випадку вноситься додаткова похибка, пов'язана з дискретністю величини Ξ . З іншого боку, сучасні комп'ютери дозволяють оперативно виконувати значні обсяги розрахунків, що дозволяє використовувати велику кількість променів для зменшення відносного вкладу цієї похибки.

3. Форма спектрального зображення вхідної щілини

Для побудови спектрального зображення вхідної щілини потрібно побудувати функцію густини розподілу точок перетину дифрагованих променів з вихідною площиною. Результати такої побудови для довжини хвилі 300 нм подано на рис.4,а-і. Прямокутник в лівому верхньому куту рисунка відповідає квадрату з розмірами 1 мм x 1 мм. Масштаб вздовж осей ξ і η у площині вихідного зображення є різним для кращого відображення абераційних спотворень.

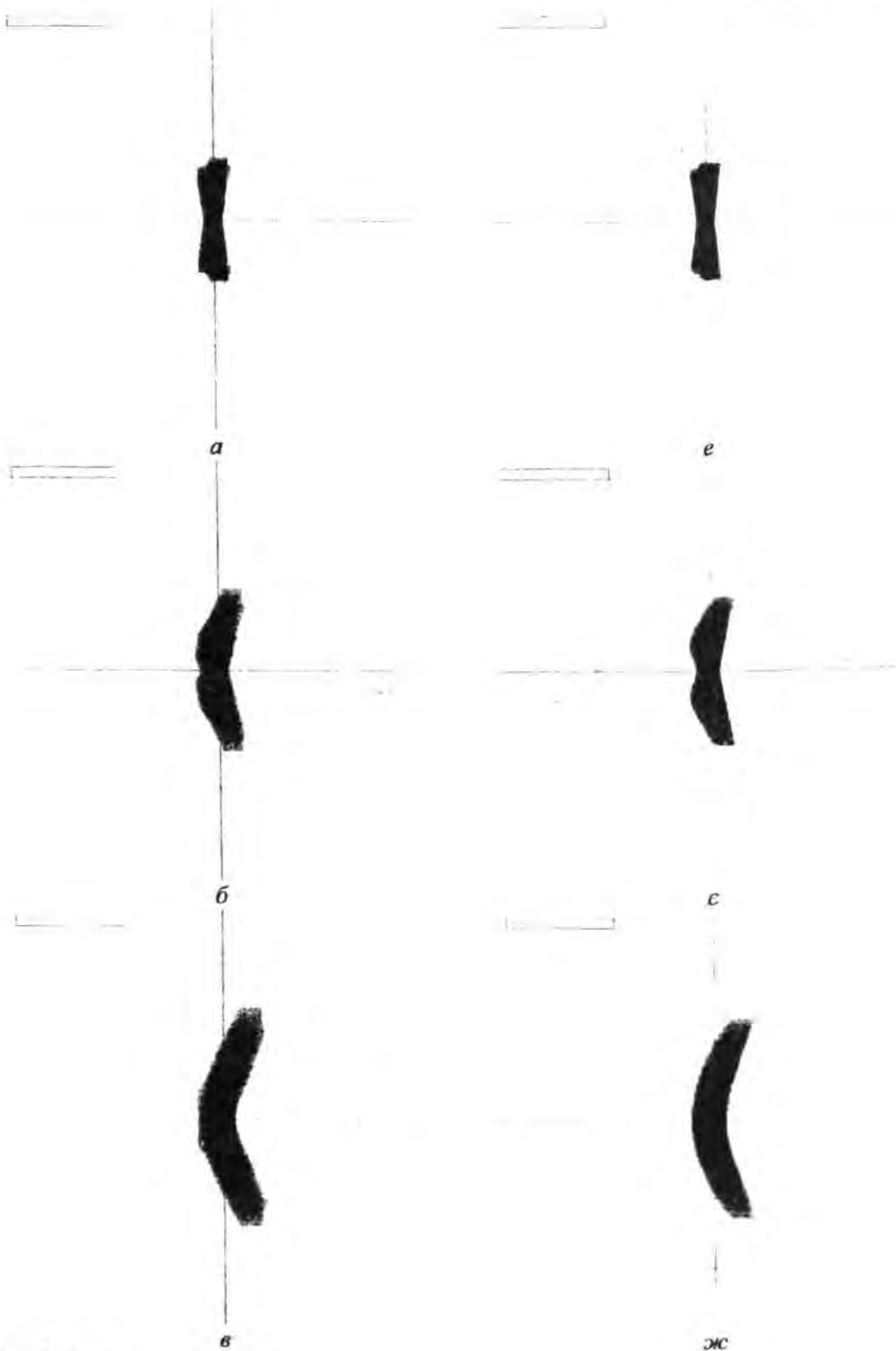


Рис.4. а-ж

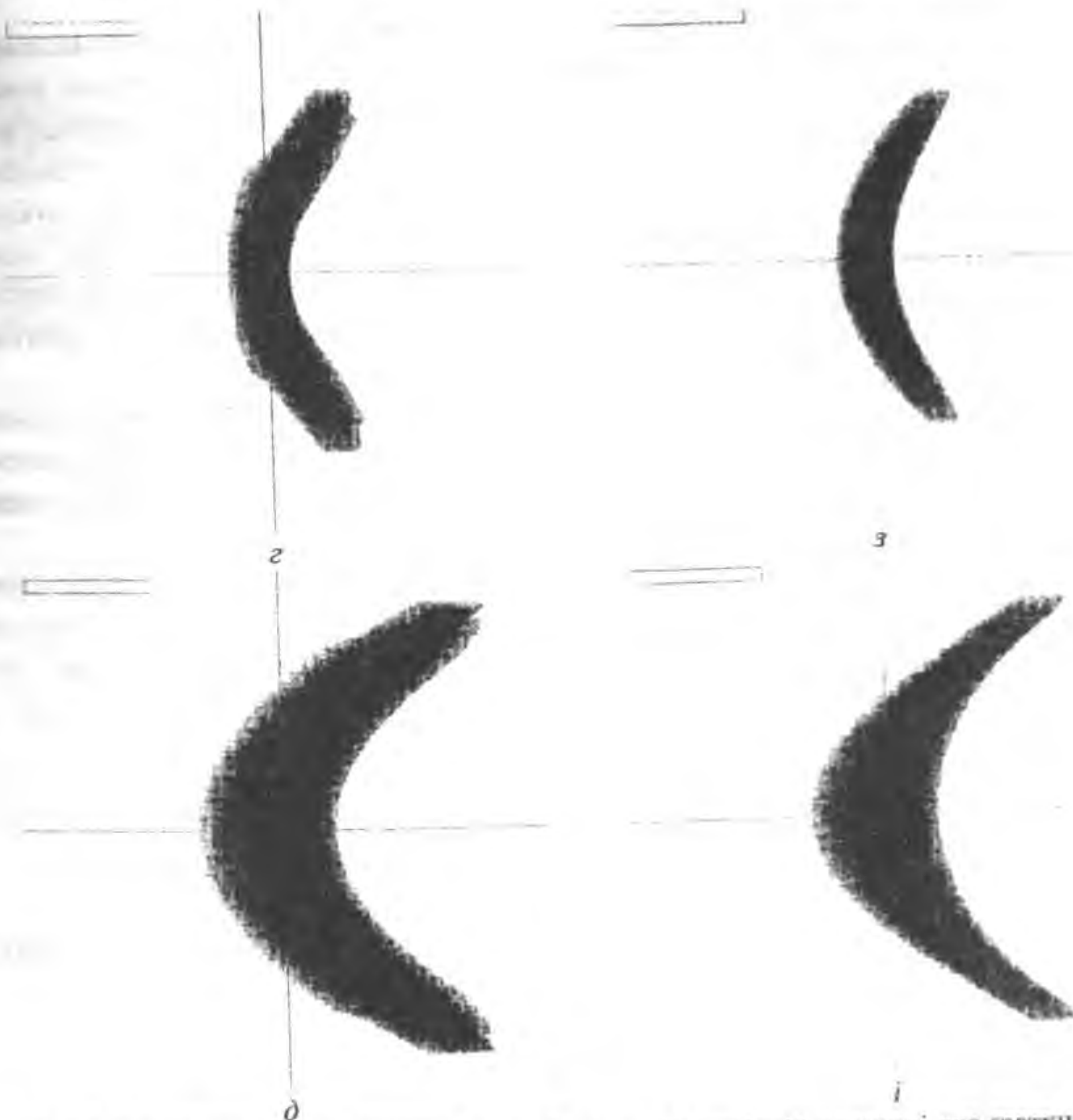


Рис.4. Спектральне зображення входної щілини у вихідній площині для ґратки із 600 штр/мм у +1 (а, е), +2 (б, є), +3 (в, ж), +4 (г, з) та +5 порядку (д, і) з використанням еліптичної діафрагми (е – і) та без неї (а – д). Для побудови зображення використовувалося більше 18,7 млн. променів. Почорніння відповідає логарифму нормованої густини розподілу променів в даній точці вихідної площини.

4. Висновки

1. Введений нами функціонал аберацій (1) дозволяє проводити оптимізацію обраної схеми для максимального врахування та зменшення абераційних спотворень спектрального зображення входної щілини. Загальною особливістю ітераційних методів є потреба введення нульових наближень.

2. Проблему дискретності функціоналу аберацій (кількості променів) можна вирішити за рахунок використання великої кількості променів – більше 4000000 в даній роботі.

3. Розрахунок схеми одинарного монохроматора за запропонованим удосконаленням чисельним методом дозволяє отримати поправочні коефіцієнти до основних геометричних параметрів, що визначають розташування оптичних елементів схеми і можуть використовуватися при її стендовому юстуванні. В результаті оптимізації схеми, розглянутої в даній роботі кількість розсіяного випромінювання можна зменшити на 4%. При цьому розрахована спектральна ширина вихідної щілини яка забезпечує в першому порядку спектра поблизу довжини хвилі 300 нм максимально ефективно використати вихідний світловий потік, складає 1,3 нм.

4. При використанні еліптичної діафрагми на ґратці помітно збільшується якість зображення щілини (в першому порядку абераційні спотворення зменшуються на 12,6%), однак разом з цим спостерігається зменшення світлосили монохроматора на 23,8%.

5. Метод дає змогу будувати і аналізувати спектральні зображення вхідної щілини для різних довжин хвиль в різних спектральних порядках. Важливим є те, що він дозволяє чисельно визначити міру розсіяного випромінювання в монохроматорі та проводити мінімізацію цієї величини.

Перелік посилань

1. Н.Н.Калиткин. Численные методы // Москва, Наука, 1978, 508с.

Надійшла до редакції 1.11.2005

УДК 541.64: 531.75: 536.6

Олексій В. Горшунов¹,
Тарас Г. Січкарь², Микола І. Шут

Граничні шари в металонаповнених епоксидних композиціях

Досліджено щільність молекулярної упаковки, теплофізичні властивості та мікротвердість металонаповнених композицій на основі епоксидної смоли ЕД-20. Отримані результати проаналізовані із залученням поняття питомого вільного об'єму наповнювача. Запропоновано якісну модель впливу мінерального наповнювача на структуру епоксидної полімерної матриці.

Ключові слова: граничний шар, епоксидний полімер, теплосмність, теплопровідність, мікротвердість, молекулярна упаковка, мінеральний наповнювач, металічний наповнювач, структуроутворення.

¹ E-mail: revenge@mail.i.com.ua
WWW: http://alexey.unoave.com

² E-mail: tsichkar@ukr.net

Вступ

Наповнення епоксидних полімерів (ЕП) металами є перспективним методом отримання ПКМ з цінним комплексом експлуатаційних властивостей. Такі композиції знаходять широке застосування в якості тепло та електропровідних лаків та клеїв. Ефективне застосування металонаповнених ЕП передбачає врахування особливостей впливу наповнювача на властивості полімерної матриці (ПМ).

Таблиця 1. Деякі характеристики дисперсних наповнювачів

Наповнювач	Густина, г/см ³	Найбільш імовірний розмір частинок, мкм	Форма частинок	Пакінг- фактор, φ_m
Мідь електролітична	8,93	11	дендрична	0,27
Нікель карбонільний	8,9	4,2	квазісферична	0,32

Alexey V. Gorshunov¹,
Taras G. Sichkar², Mykola I. Shut

Interface layers in metal-filled epoxy-based compositions

Molecular packing density, thermal-physical properties and microhardness of DGEBA-based metal-filled epoxy compositions investigated. Experimental results analyzed using idea of filler's specific free volume. Mineral filler on epoxy matrix structure influence qualitative model suggested.

Key Words: interface layer, epoxy polymer, heat capacity, heat conductivity, microhardness, molecular packing, mineral filler, metal filler, structure formation.

В нашій роботі досліджено КПМ на основі епоксидної діанової смоли ЕД-20, отвердженої поліетиленполіамінами (ПЕПА), наповненої різними кількостями дисперсних металічних наповнювачів (табл. 1). Ми аналізували вплив малих кількостей металевого наповнювача на властивості полімерної матриці. Для цього виявилось зручно використовувати в якості параметру питомий вільний об'єм наповнювача φ_f (ПВОН).

Теоретичні відомості

Одинією із характеристик наповнювача виступає пакінг-фактор. Пакінг-фактор визначає межу наповнення системи і визначається як [1, 2]:

$$\varphi_m = \frac{V_n}{V_n + V_p} \quad (1)$$

де V_n – об'єм, що займають частинки наповнювача при їхньому максимальному вмісті,

V_p – об'єм вільного простору між частками, заповнений полімером. Для монодисперсних сферичних частинок при їхньому статистичному розподілі $\varphi_m = 0,64$. Пакінг-фактор може суттєво залежати від способу приготування композиту. Так при акустичній обробці відповідної потужності або при формування зразків під тиском вдається значно підвищити пакінг-фактор.

В роботі [3] запропоновано в якості узагальнених параметрів наповнення використовувати середню відстань між частинками наповнювача та питомий вільний об'єм наповнювача.

Середня відстань між частинками наповнювача є зручним параметром, оскільки дозволяє аналізувати властивості композиту співставляючи її з такими величинами як характерний розмір надмолекулярних утворень та товщина граничних шарів на межі полімер-наповнювач. Однак визначати середню відстань між частинками наповнювача не завжди зручно. Наприклад, у випадку дрібнодисперсного наповнювача, коли стають суттєвими флуктуації у розподілі наповнювача в полімерній матриці або у випадку полімодального розподілу частинок наповнювача за розмірами.

Тому в роботі [3] пропонують користуватися параметром питомого вільного об'єму наповнювача.

Питомий вільний об'єм наповнювача (ПВОН) визначається як:

$$\varphi_f = \frac{\varphi_m - \varphi_n}{\varphi_n} \quad (2)$$

де φ_n – об'ємна частка наповнювача,

φ_m – максимальна об'ємна частка наповнювача (пакінг-фактор).

Середня відстань між частинками наповнювача є зручною для аналізу величиною, але складною для визначення. Питомий вільний об'єм

наповнювача добре корелює з величиною середньої відстані між частинками наповнювача в широкому діапазоні ступенів наповнення та розмірів частинок (коефіцієнт кореляції 0,85) [3]. Саме тому в нашій роботі ми користувалися величиною ПВОН.

З формули (2) видно, що величина ПВОН нелінійно залежить від ступеня наповнення φ_n . Обидві величини є безрозмірними і універсальними для будь-яких матеріалів наповнених дисперсними наповнювачами. Менші значення ПВОН відповідають більшим ступеням наповнення. Чистому полімеру без наповнювача відповідає нескінченно велике значення ПВОН.

Методи дослідження

Пакінг фактор наповнювачів визначали за формулою:

$$\varphi_m = \frac{m}{V \cdot \rho}, \quad (3)$$

де m – маса дисперсного наповнювача, V – ефективний об'єм, який займає наповнювач в циліндричній посудині під поршнем, ρ – істинна густина речовини наповнювача. Відносна похибка вимірювання пакінг фактору не перевищувала 5%.

Густина зразків КПМ визначали методом гідростатичного зважування в етиловому спирті. Похибка вимірювання густини не перевищувала 0,005 г/см³. Густина полімерної матриці розраховували за формулою

$$\rho_m = \frac{m_m}{\frac{m_n + m_m}{\rho} - \frac{m_n}{\rho_n}}, \quad (4)$$

де ρ_m – середня густина полімерної матриці, ρ_n – густина речовини наповнювача, ρ – виміряна густина КПМ, m_n – маса наповнювача у зразку, m_m – маса полімеру у зразку.

Температурну залежність питомої теплоємності визначали за допомогою ДТА-калориметра. Похибка вимірювання теплоємності не перевищувала 2%.

Теплопровідність вимірювали за допомогою модернізованого серійного λ -калориметра ИТ- λ -400. Точність вимірювання теплопровідності складала 3%.

Мікротвердість вимірювали за допомогою стандартного приладу ПМТ-3, який являє собою спеціальний мікроскоп для вимірювання мікротвердості різних матеріалів. Для отримання достовірних результатів, на кожному зразку вимірювали від 12 до 24 діагоналей відбитків і брали середнє арифметичне значення твердості. Випадкова похибка при цьому коливалася в межах 5÷25% в залежності від характеру поверхні зразка.

Залежність $dC_p/dT=f(T)$ розраховували із температурної залежності теплоємності отриманої за допомогою ДТА калориметра.

Вплив наповнювача на щільність молекулярної упаковки

Як уже зазначалось в першому розділі, металевий наповнювач зменшує щільність молекулярної упаковки епоксидної матриці. Це проявляється у меншій реальній густині ПКМ у порівнянні із густиною розрахованою за принципом адитивності. Причому ця різниця збільшується із збільшенням ступеня наповнення. Результати гідростатичного зважування подані на рис 1 показують, що при зменшенні величини ПВОН до 20÷50 одиниць і менше спостерігається стрімке розрихлення полімерної матриці.

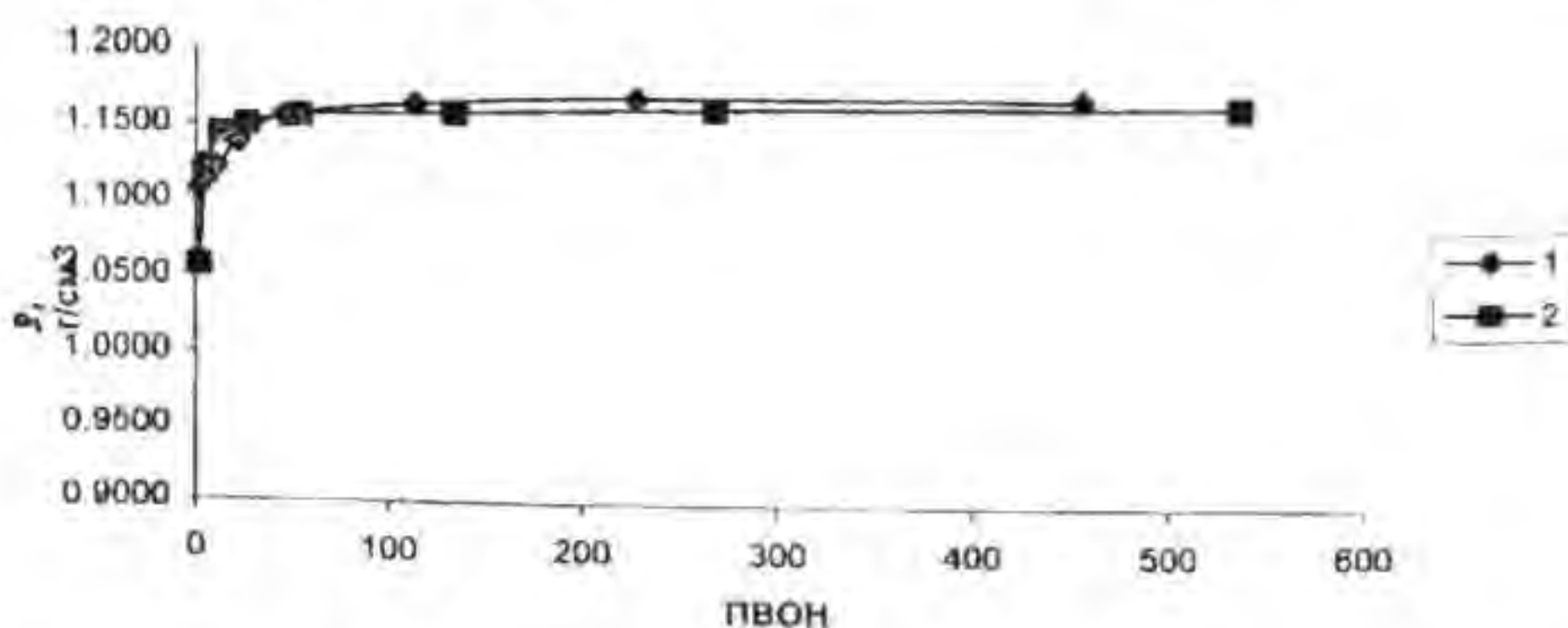


Рис. 1. Густина полімерної матриці при різних значеннях питомого вільного об'єму наповнювача. Криві 1 та 2 побудовані для композицій на основі ЕС ЕД-20 наповненої міддю та нікелем відповідно.

Вплив наповнювача на теплофізичні властивості полімерної матриці

При введенні металевих наповнювачів питома теплоємність зменшується внаслідок того, що метали мають в кілька разів меншу питому теплоємність ніж ЕП. Для зразків наповнених міддю було виконано розрахунок тієї частини питомої теплоємності, яка зумовлена теплоємністю ЕП за формулою:

$$C_{pm} = \frac{(100 + n) \cdot C_p - n \cdot C_{pn}}{100},$$

де C_{pm} , C_{pn} , C_p - питомі теплоємності полімерної матриці (ПМ), наповнювача та виміряна питома теплоємність композиції вцілому, n - вміст наповнювача в масових частинах на 100 масових частин ЕП.

Виявилось, що питома теплоємність ПМ взагалі мало залежить від вмісту наповнювача, але за рухунок теплоємності граничного шару може дещо підвищуватись або понижуватись (рис. 4).

Температури фазових переходів, зокрема температура склування, також чутливі до вмісту наповнювача (рис. 5а, б).

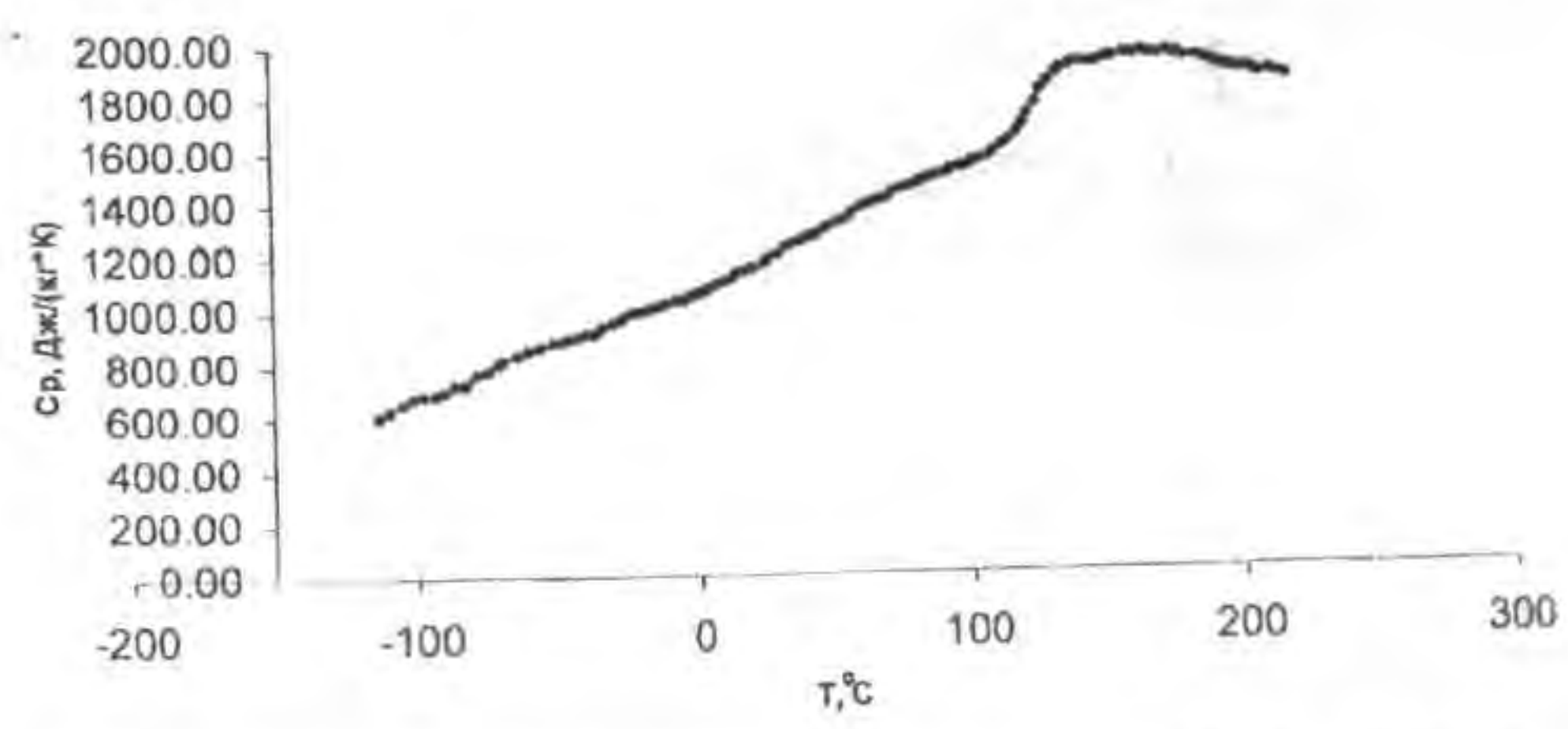


Рис. 2. Питома теплоємність ЕП на основі ЕС ЕД-20 отвердженої поліетиленполіамінами без наповнювачів та модифікаторів.

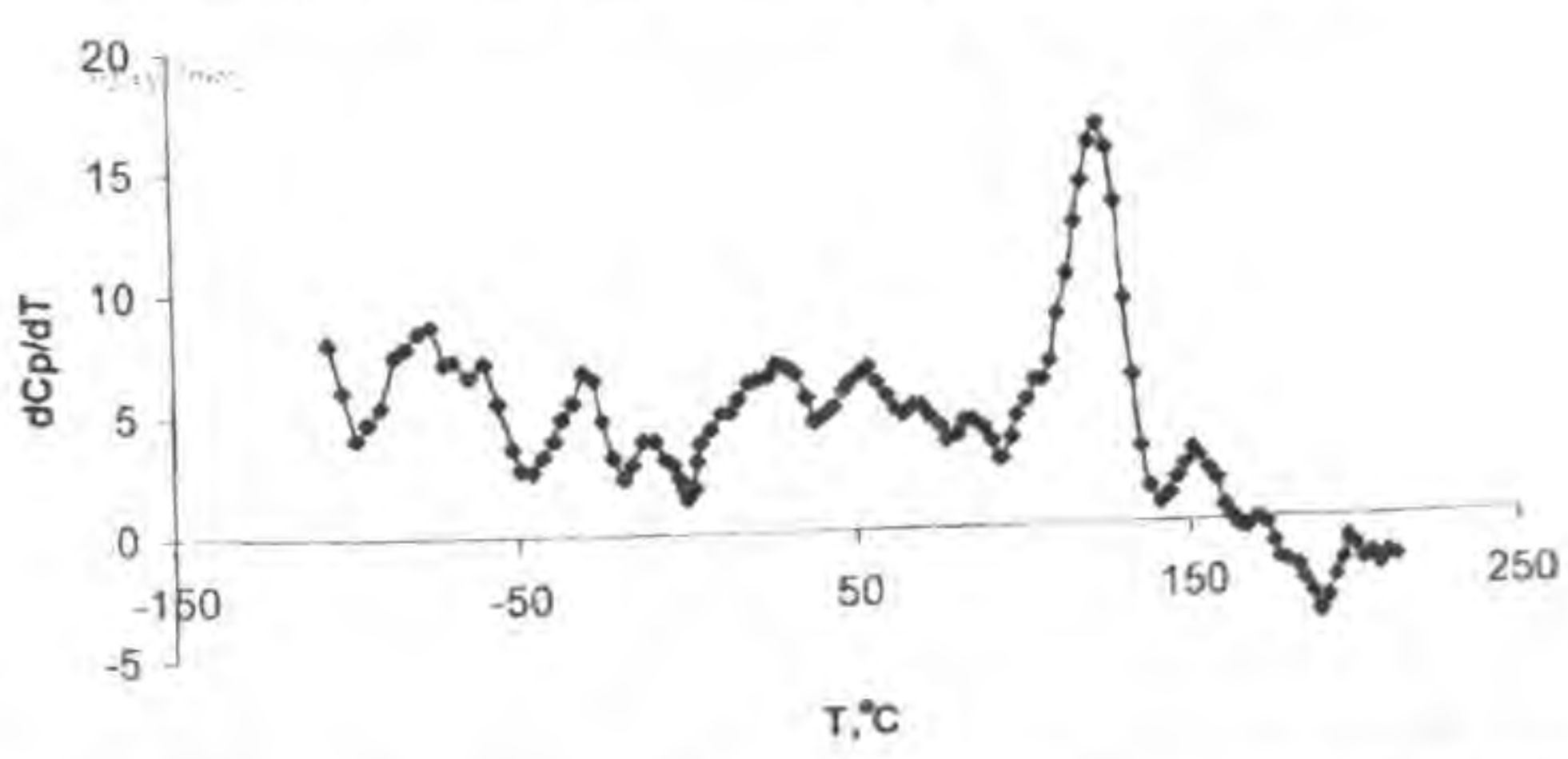


Рис. 3. Похідна питомої теплоємності по температурі для ЕП на основі ЕС ЕД-20 отвердженої поліетиленполіамінами без наповнювачів та модифікаторів.

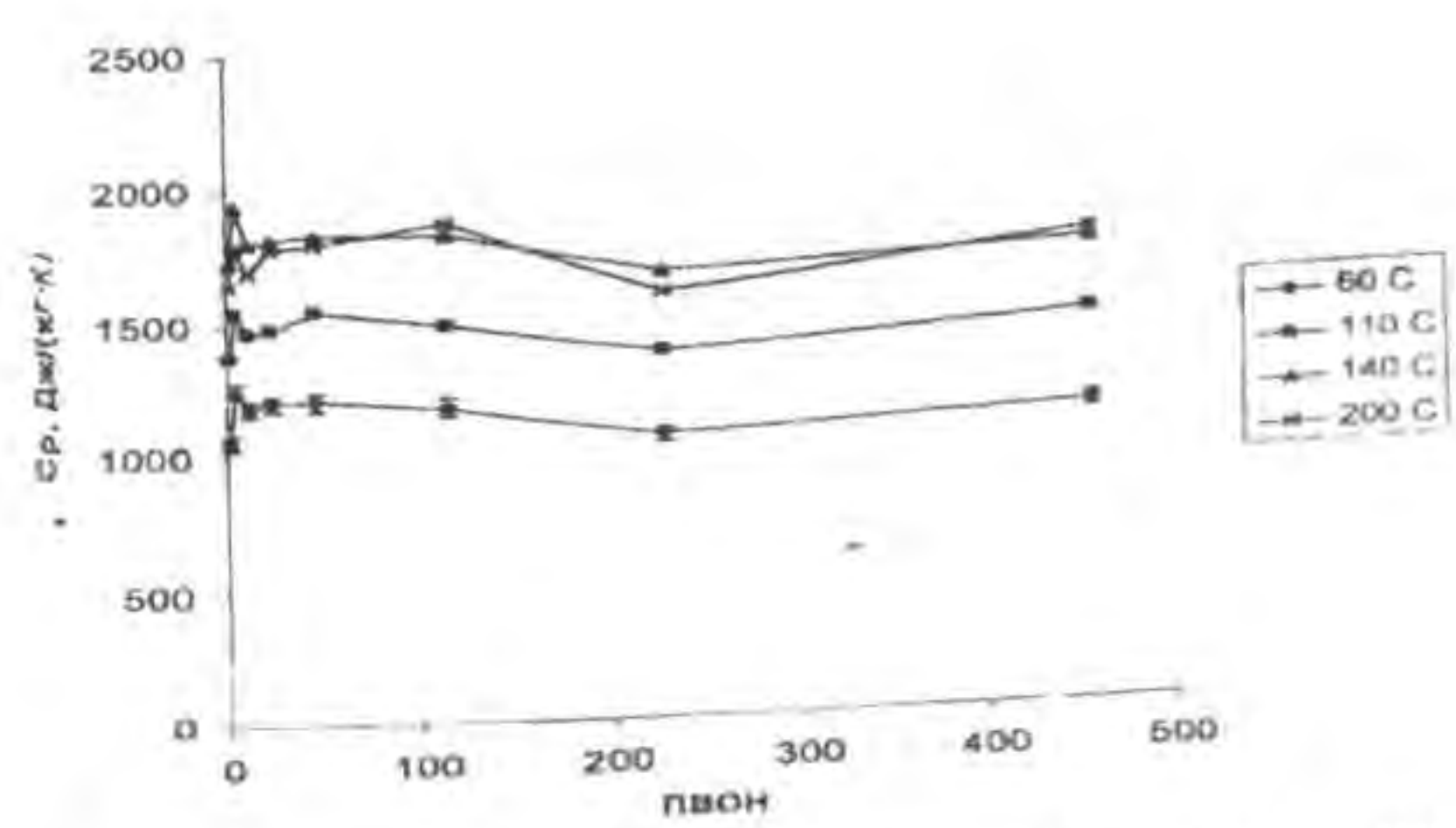


Рис. 4. Питома теплоємність ПКМ наповнених міддю при різних температурах.

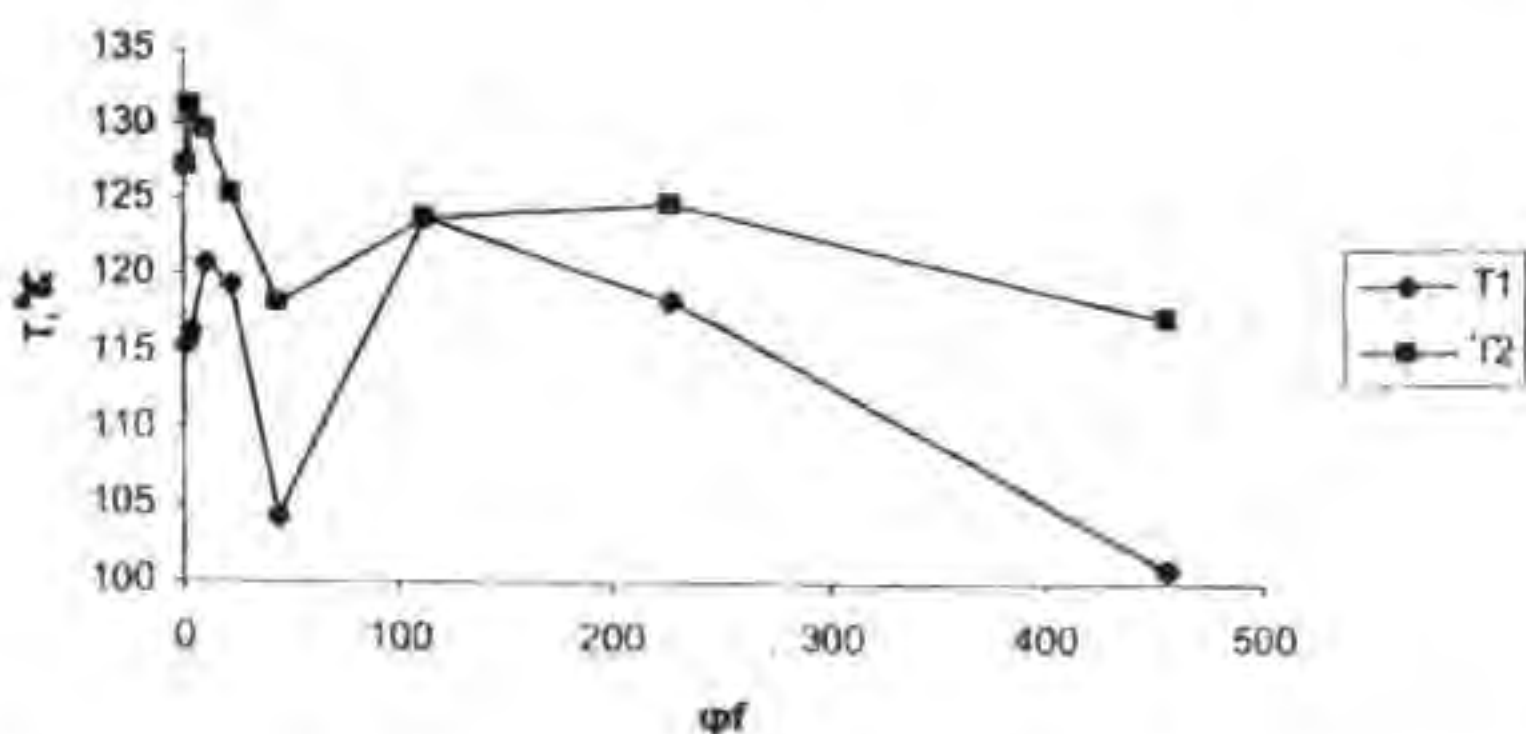


Рис. 5а. Температурне положення "низькотемпературного" T_1 і "високотемпературного" T_2 стрибків склування для КПМ наповнених міддю.

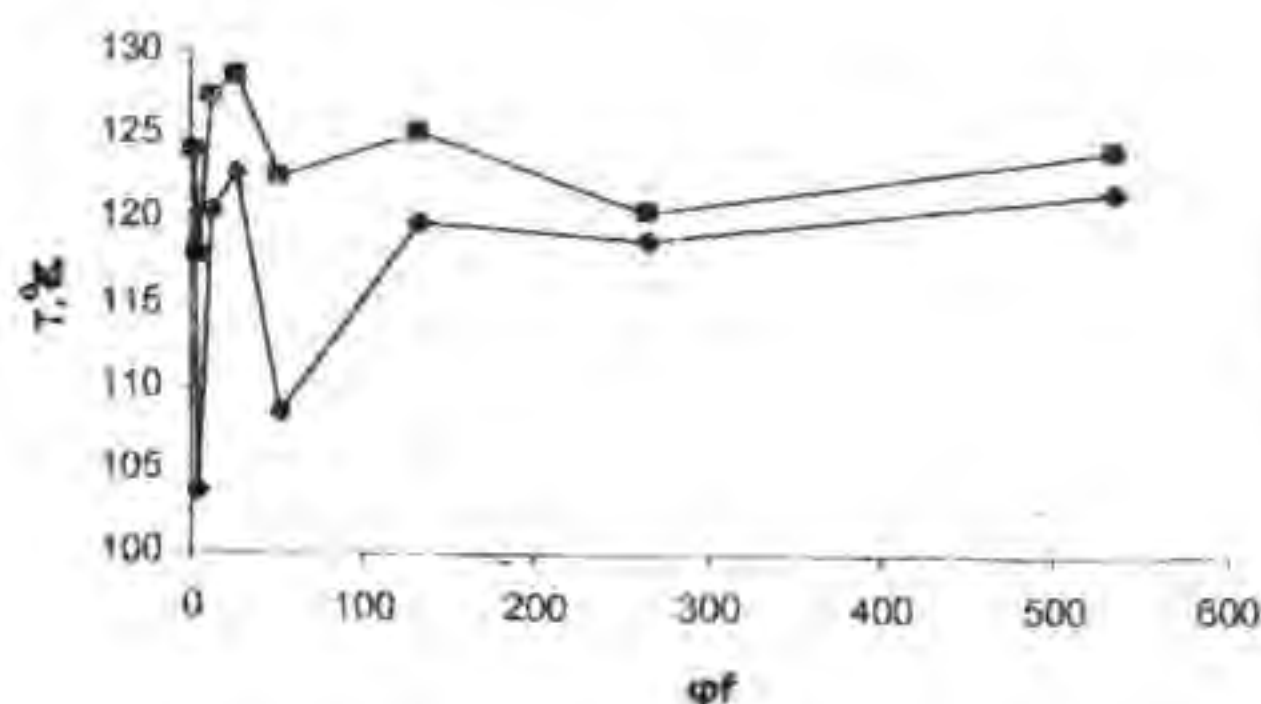


Рис. 5б. Температурне положення "низькотемпературного" T_1 і "високотемпературного" T_2 стрибків склування для КПМ наповнених нікелем.

Теплопровідність є показовою характеристикою для металонаповнених ПКМ. Вона дозволяє спостерігати значні "ефекти" при незначних змінах структури матеріалу.

При збільшенні вмісту металевого наповнювача теплопровідність ПКМ закономірно зростає (рис. 6). В дослідженому температурному інтервалі із збільшенням температури теплопровідність (в межах 3% похибки методу) зростає лінійно. Навіть перехід системи із склоподібного стану у в'язкотекучий помітно не впливає на теплопровідність.

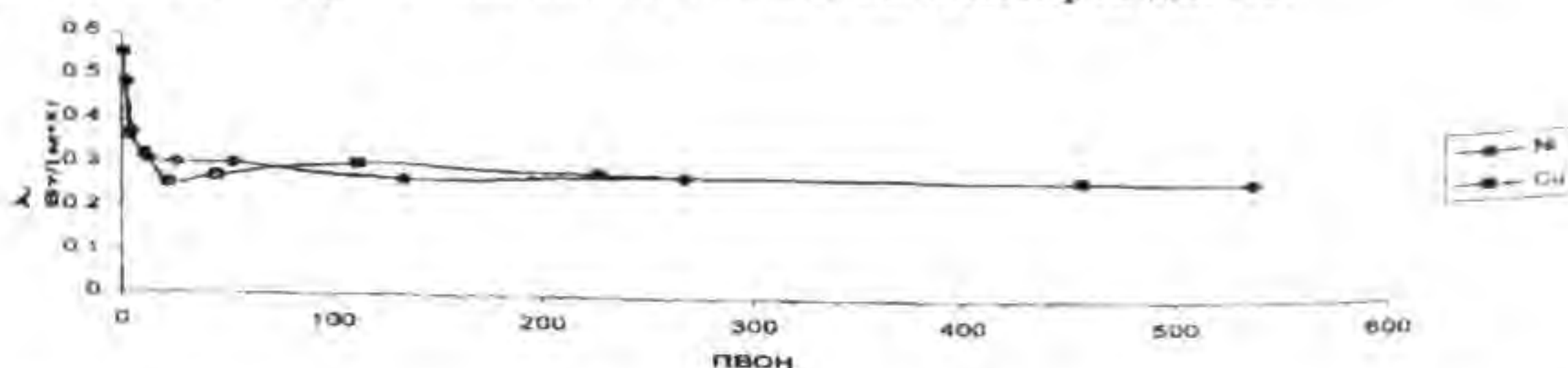


Рис. 6. Теплопровідність ПКМ при різних ступенях наповнення при температурі 100°C.

Мікротвердість

Важливою і практично значущою характеристикою ПКМ є мікротвердість.

Мікротвердість ЕП без наповнювачів та неповністю отверджених зразків наведена у табл. 2. Точність вимірювання не дозволяє навести більш точні дані, але можна твердити, що в усіх випадках недоотверджені зразки мають дещо більшу мікротвердість ніж повністю отверджені. Очевидно це можна пояснити більшою кількістю фізичних вузлів сітки в неповністю отверджених зразках.

Таблиця 2. Мікротвердість деяких епоксидних композицій

Зразок	Мікротвердість Н, кг/мм ²
ЕП без наповнювачів	10÷11
ЕП неповністю отверджений	11÷12
ЕП з 100 мас.ч. міді	≈14
ЕП з 100 мас.ч. нікеля	≈17

При наповненні металами, мікротвердість ЕП зростає внаслідок того, що металічний наповнювач має більшу мікротвердість ніж ПМ. Дисперсність наповнювача має в цьому випадку велике значення. Так лінійний розмір відбитку алмазної піраміди при вимірюванні мікротвердості складає 20÷40 мкм. Це порядок відстаней між частинками наповнювача та розміру самих частинок. Тому похибка вимірювання мікротвердості таких ПКМ складає величину співрозмірну з величиною очікуваних ефектів. Виявилось, що більш "яскраві" ефекти спостерігаються при вимірюванні мікротвердості відпалених зразків ЕП.

Ми відпалювали зразки протягом 500 годин при температурі 80°C (це на 45 градусів нижче температури склування). Відомо, що в результаті відпалювання відбувається релаксація внутрішніх напружень, що утворилися під час формування ЕП, досягається щільніша упаковка молекул, структура стає більш рівноважною. Закономірним наслідком цього є збільшення мікротвердості ПМ в порівнянні з невідпаленими зразками. Крім того, відпалені зразки демонструють суттєву залежність мікротвердості від вмісту наповнювача (рис. 7). Видно (рис. 7), що ефекти значно перевищують рівень похибки методу.

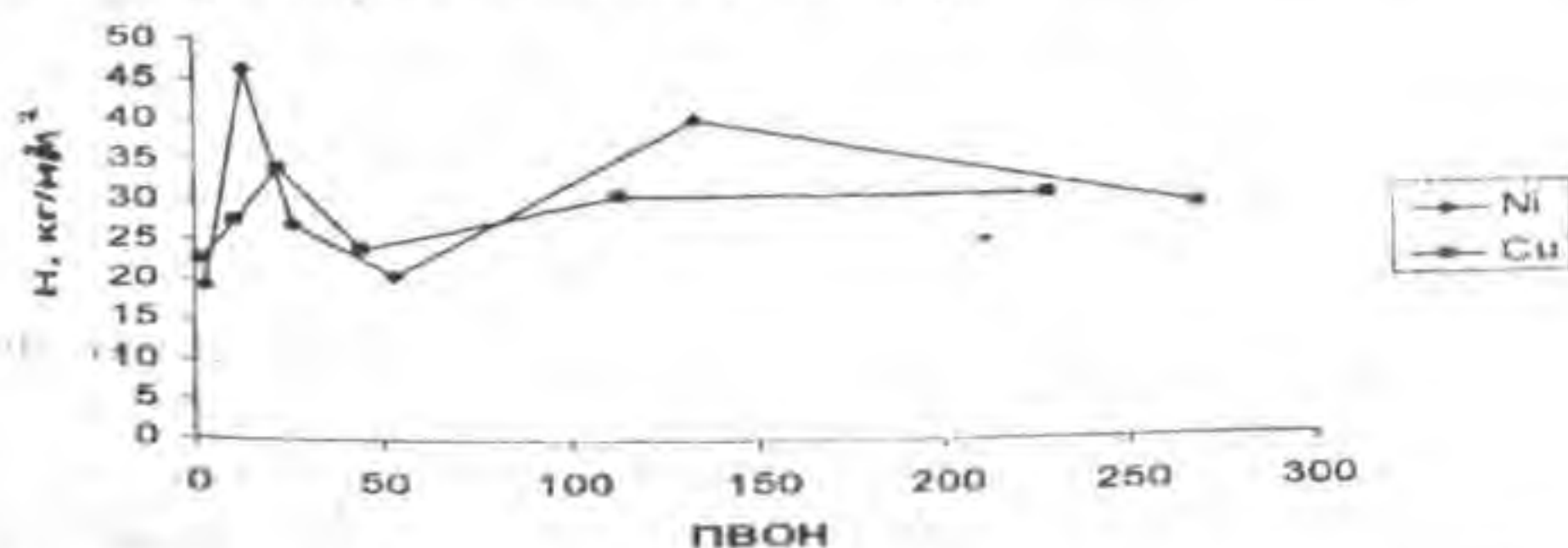


Рис. 7. Мікротвердість металонаповнених ЕП після відпалювання.

Модель системи епоксидний полімер-наповнювач

Вище було наведено результати багатьох вимірювань властивостей ПКМ. Спробуємо пояснити і узагальнити їх. Ми пропонуємо модель системи на основі ЕП наповненого мінеральним наповнювачем.

Вихідне положення при побудові нашої моделі – це суттєва відмінність властивостей полімерної матриці поблизу поверхні наповнювача від ПМ в об'ємі полімеру. Тобто наявність на поверхні частинок наповнювача граничного шару. Під граничним шаром будемо розуміти частину ПМ, сформовану під дією поверхні наповнювача. Ця діє проявляється в орієнтуванні та частковій адсорбції молекул олігомеру на стадії формування сітки хімічних зв'язків. Таким чином кожна частинка наповнювача оточена шаром адсорбованих її поверхнею кінців молекул та особливим шаром тривимірної сітки, в якому ланки певним чином орієнтовані по відношенню до поверхні. Таким чином ми маємо справу з адсорбційним та орієнтаційним граничними шарами. Товщина цих шарів буде залежати від способу вимірювання. Властивості ПМ будуть мати певний градієнт вздовж нормалі до поверхні частинки наповнювача. Суттєвою відмінністю нашого підходу від існуючої в літературі концепції граничного шару буде те, що ми по-перше не будемо намагатись усереднювати власивості в межах цього шару, а по-друге не будемо робити припущень про його ізотропність. Насправді відомо, що полімери в орієнтованому стані є анізотропними.

Прослідкуємо зміну власивосей ПКМ при зменшенні ПВОН тобто при зменшенні середньої відстані між частинками наповнювача. При значеннях ПВОН більших 100 одиниць всі фізичні властивості ПКМ практично (в межах похибки вимірювання) відповідають властивостям ненаповненого ЕП (рис. 1). Незначні відхилення спостерігаються лише через хімічну дію поверхні наповнювача (розчинення наповнювача, прискорення або уповільнення процесів окислення ПМ тощо).

Із зменшенням ПВОН до 20÷50 одиниць частинки наповнювача наближаються одна до одної на відстань порядку подвійної товщини орієнтаційного граничного шару. Із подальшим зменшенням ПВОН процес формування сітки хімічних зв'язків ускладнюється, адже молекули ЕО та сформовані частини сітки тепер можуть зазнавати впливу кількох частинок наповнювача одночасно. Це сприяє формуванню менш щільної сітки хімічних зв'язків (рис. 1). В таких умовах, молекулярний рух дещо ускладнюється. Це проявляється у незначному зменшенні питомої теплоємності ПМ в проміжку 50÷10 одиниць ПВОН (рис. 4) та збільшенні температури склування композиції (рис. 5). Поряд з цим при значеннях ≈20 одиниць ПВОН граничні шари сусідніх частинок знаходяться настільки близько, що орієнтовані частини сітки хімічних зв'язків утворюють містки між поверхнями частинок. Це проявляється у стрімкому зростанні теплопровідності (рис. 6) та мікротвердості (рис. 7). Утворення подібних містків, які служать ніби каркасом ПКМ є наслідком анізотропії орієнтаційного граничного шару.

При зменшенні ПВОН менше 10 одиниць спостерігається ефект, коли сусідні частинки наповнювача починають компенсувати орієнтуючу дію одна одної. При цьому знову полегшується молекулярна рухливість. В результаті дещо збільшується теплоємність (рис. 4), а температура склування (рис. 5) та мікротвердість (рис. 7) навпаки стрімко зменшується.

Нарешті, при значеннях ПВОН менше 5 одиниць, майже весь ЕП знаходиться в стані граничного шару (імовірно адсорбційного) і властивості ПМ на будь якій відстані від поверхні частинок наповнювача майже не відрізняються. При подальшому зменшенні ПВОН спостерігаються відомі для металонаповнених композитів ефекти, які докладно не розглядаються в нашій роботі. Спочатку з'являється тунельна а потім і контактна електро та теплопровідність.

Наведена модель якісно пояснює всі отримані нами експериментальні дані. Стосовно достовірності наведених даних можна сказати, що всі ефекти на які спирається наша модель мають величину, що в рази (а в деяких випадках на порядок) перевищує рівень похибок відповідного методу. Всі ефекти спостерігались для обох типів наповнювача: міді та нікелю. Для всіх методів використовувались різні екземпляри зразків. При цьому суворо дотримувалась технологія приготування. Тому не можна твердити про зумовленість спостережуваних ефектів недбалістю приготування зразків.

Значення ПВОН ≈ 20 одиниць при якому стрімко починає зростати теплопровідність відповідає середній відстані між частинками наповнювача 40 та 13 мкм для міді та нікелю відповідно. Враховуючи наше припущення про те, що в такій системі граничні шари сусідніх частинок починають частково перекриватися, можна оцінити товщину орієнтаційного граничного шару. Вона виявляється порядку 11 та 4 мкм для міді та нікелю відповідно. Більша товщина орієнтаційного граничного шару у випадку мідного наповнювача може бути зумовлена більшим розміром його частинок. Подібний масштабний ефект відмічався також в [4].

В роботі [5] товщина граничного шару визначена для неотверджених ЕС з різними металевими наповнювачами віскозиметричним методом не перевищувала 80 нм. Однак ця товщина стосується лише граничного шару, що утворився внаслідок адсорбційної взаємодії олігомер-наповнювач. Орієнтуюча дія поверхні наповнювача не встигає проявлятися внаслідок великого (для цього типу досліджень) часу релаксації молекулярних агрегатів а також значних напруг зсуву ($10^4 \div 10^5$ Па), що виникають між сусідніми шарами ЕС. Тому результати [5] не протирічать нашим, оскільки мають справу з іншим тлумаченням граничного шару.

В літературі немає єдності в питаннях методів визначення товщини граничного шару [6], як і єдності у визначенні самого поняття граничного шару. За різними оцінками його товщина складає 8÷40 нм. При цьому під граничним шаром, як правило, мають на увазі шар адсорбованих на

поверхні частинок наповнювача макромолекул полімеру.

В роботі [7] розкрито вплив властивостей граничного шару на механічні властивості ПКМ. Напруженість електричного поля, що виникає внаслідок перерозподілу електричного заряду на поверхні частинки наповнювача, складає порядку 1 МВ/м. Це призводить до орієнтації диполей, що входять до складу молекул епоксидного олігомеру. В результаті поверхня частинки наповнювача потужно впливає на процеси структуроутворення ЕП. Це на нашу думку і є причиною утворення орієнтаційного граничного шару в процесі отвердження ЕП.

Висновки

В нашій роботі показано, що параметр питомого вільного об'єму є універсальним для ПКМ з різними ступенями наповнення, наповнювачами та полімерними в'язучими. Його застосування особливо зручне у випадках, коли неможливе пряме визначення відстані між частинками наповнювача або інших аналогічних параметрів структури.

Проведені експериментальні дослідження дозволили запропонувати якісну модель системи епоксидний-полімер – мінеральний наповнювач, яка враховує анізотропію властивостей орієнтаційного граничного шару і дозволяє пояснювати складний механізм дії мінерального наповнювача на структуру полімерної матриці а отже і прогнозувати експлуатаційні властивості полімерного композиційного матеріалу.

Література

1. Наполнители для полимерных композиционных материалов. Под ред. Г.С.Каца и Д.В.Милевски.- М.: Химия, 1981.- 736 с.
2. Е.П.Мамуня, В.В.Давиденко, Е.В.Лебедев. Свойства функционально наполненной системы в зависимости от содержания и характеристик дисперсного наполнителя // Композиц. полим. матер.- 1991.- Вып.50. - С.37-47.
3. Симонов-Емельянов И.Д., Кулезнев В.Н., Трофимичева Л.З. Обобщенные параметры дисперсной структуры наполненных полимеров // Пластические массы, 1989, № 1, с. 19 – 22.
4. Липатов Ю. С. Физико-химия наполненных полимеров. Киев, Наукова думка, 1967, - 233 с.
5. Реологічні властивості металонаповненого епоксидного олігомеру / Давиденко В.В., Мамуня Є.П., Лебедев Є.В., Шут М.І. // Вопросы химии и химической технологии.- 2003.- №3.- С.78-83.
6. Шут Н. И. Тепловые процессы и релаксационные явления в полимерах и композициях на их основе. Дисс. д. ф.-м. н., М., 1989, 403 с.
7. Луцкейкин Г. А. Моделирование упругих и механических прочностных свойств наполненных полимеров и композитов // Пласт. массы.- 2003.- №1.- с. 36-39.

Надійшла до редакції 24.11.2005

УДК 535:537:539:546

Леонід Г. Гречко, докт. ф.-м. наук,
Леонід Б. Лерман, канд. техн. наук,
Дмитро М. Водоп'янов, аспірант,
Наталя Г. Шкода, канд. ф.-м. наук,
Сергій В. Шостак, канд. ф.-м. наук

**Іонно-електростатична взаємодія
малих кульових частинок в розчи-
ні електроліту. Частина II. Обчис-
лення енергії взаємодії при заданих
щільностях поверхневих потенціа-
лів**

Побудовано розв'язок рівнянь
Дебая-Х'юккеля для системи куль з
довільними радіусами та поверхне-
вими потенціалами, розташованих в
електроліті. Розвинуто загальний
теоретичний метод розрахунку вза-
ємодії частинок в таких системах.
Докладно розглянуто практично ва-
жливий випадок двох куль. Із загаль-
них співвідношень в нульовому на-
ближенні отримано кінцеві формули
для визначення енергії взаємодії двох
сферичних частинок зі сталими по-
верхневими потенціалами. Приво-
дяться результати порівняльних роз-
рахунків за різними формулами.

Ключові слова: рівняння Дебая-
Х'юккеля, малі частинки в електро-
літі, подвійний шар, енергія взаємодії

E-mail: user @ surfchem.freenet.kiev.ua

Leonid G. Grechko, Dr. Sc.,
Leonid B. Lerman, Ph. D.,
Dmitro M. Vodopyanov,
post gradient student,
Natalya G. Shkoda, Ph. D.,
Sergiy V. Shostak, Ph. D

**Ion-electrostatic interaction of small
spherical particles in an electrolyte
solution. Part II. Definition of interac-
tion free energy with known densities
of surfaces' potentials**

The solution of the Debye-Huckell
equation for a system spheres with arbi-
trary radii and surfaces charges in elec-
trolyte solutions is construction. The
general theoretical method of such sys-
tems description is elaborated. The
practical important case of two spheres
is considered in detail. Finite closed
formulae to calculation of interaction
energy of two spherical particles with
constant surface potentials are obtained
from general expressions in zero ap-
proximation. Some results of compari-
son calculations on different formulae
are presented.

Key words: Debye-Huckell equa-
tion, particles in electrolyte, pair inter-
action

1. Introduction. In this part of our general work we consider the case of ad-
justed potentials on sphere surfaces. We use the general scheme as in Part I with the
same expansion of potentials and the same additional theorem. But in contrast to the
case of adjusted densities of surfaces' charges this problem is simpler one. In this case
only one group of boundary conditions in formulae (3) in [1] is remained, and the
number of the functional equations primary equals N . Formulae for calculation of in-
teraction energy are changes in this case too.

The practical important case of two spheres is considered in detail, and some results of worked out calculations using our results and formulae of other authors are presented for both cases as adjusted charges as adjusted potentials too.

2. Statement of problem for system of N spheres with known potentials and its solution with help of addition theorem. A system of N spherical particles in an electrolyte solution with permittivity ε_m is considered, and we keep all designations of Part I of this paper. As before, in the electrostatic approximation every potential $\varphi_k^>$ ($k = 1, 2, \dots, N$) is a solution of the *Debye-Huckell* equation

$$\Delta \varphi_k^> - \kappa^2 \varphi_k^> = 0, \quad (1)$$

but fields within spheres are not taken into account.

We assumed that surfaces potentials Ψ_k are constant and boundary conditions on the surface of the k -th sphere at $r_k = a_k$ can be formulated in next way:

$$\varphi_1^> + \varphi_2^> + \dots + \varphi_k^> + \dots + \varphi_N^> = \Psi_k, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (2)$$

The boundary conditions (2) reflect a continuity of potentials. As usually, it is necessary to add condition of potentials' limits:

$$\varphi_k^> \rightarrow 0 \text{ at } r_k^> \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Outside of the spheres the expansions appear to be

$$\varphi_k^> = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l B_{lm}^{(k)} k_l(\kappa r_k) Y_{lm}(\theta_k, \varphi_k). \quad (4)$$

where $Y_{lm}(\theta_k, \varphi_k)$, $l = 0, 1, 2, \dots$, $m = -l, -l+1, \dots, 0, 1, 2, \dots, l$ are the normalized spherical functions, and the modified spherical Bessel functions of third kind $k_l(z)$ are used.

As in the part I of the our paper [1] total potential in the surrounding media can be written as follows

$$\varphi^> = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l B_{lm}^{(k)} [k_l(\kappa r_k)] Y_{lm}(\theta_k, \varphi_k) + \sum_{j=1}^N \left[\sum_{l_j=0}^{\infty} \sum_{m_j=-l_j}^{l_j} B_{l_j m_j}^{(j)} [k_{l_j}(\kappa r_j)] Y_{l_j m_j}(\theta_j, \varphi_j) \right], \quad (5)$$

where the stroke near the sum means that the term with subscripts $j = k$ is excluded.

The problem consists in determination of unknown coefficients $A_{lm}^{(k)}$ in the expansions of potentials (5) from boundary conditions (2). Potential with using addition theorem (formula (8) in [1]) in the local coordinates linked with the k -th sphere is to be

$$\begin{aligned} \varphi^> = & \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l B_{lm}^{(k)} k_l(\kappa r_k) Y_{lm}(\theta_k, \varphi_k) + \\ & \sum_{j=1}^N \sum_{l_j=0}^{\infty} \sum_{m_j=-l_j}^{l_j} B_{l_j m_j}^{(j)} \sum_{l'_j=0}^{\infty} \sum_{m'_j=-l'_j}^{l'_j} (-1)^{l'_j-m'_j} Y_{l'_j m'_j}(\theta_k, \varphi_k) i_{l'_j}(\kappa r_k) \times \\ & \times \left\{ \sum_{l''_j} Y_{l''_j m''_j}(\theta_{jk}, \varphi_{jk}) k_{l''_j}(\kappa R_{jk}) \varphi_{m''_j - m'_j, m_j - m'_j}^{l_j l'_j l''_j} \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

where $i_l(z)$ are the modified spherical Bessel function of the first kind, and other designations are decoded in [1].

The expansions of the total potential we substitute to the boundary conditions (2). As result, we have the system of N functional equations. Then we multiply the obtained equations by the complex conjugate functions $Y_{lm}^*(\theta_k, \varphi_k)$ and integrate over the surface of the sphere. The procedure leads to a family of infinite systems of algebraic linear equations. As the spherical harmonics are orthogonal functions, and we assume that they are normalized, we have for the integrals next values ($\delta_{ll'}$ is the delta Kroneckera function):

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta = \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

So in summation by indexes l_j', m_j' the terms with subscripts $l_j' = l, m_j' = m$ are remained only, and in the case of constant surfaces potentials we get the following systems

$$B_{lm}^{(k)} k_l(\kappa a_k) + (-1)^{l-m} i_l(\kappa a_k) \sum_{j=1}^N \sum_{l_j=0}^{\infty} \sum_{m_j=-l_j}^{l_j} B_{l_j m_j}^{(j)} \times \\ \times \left\{ \sum_{l_j} Y_{l_j, m_j, -m_j}(\theta_{jk}, \varphi_{jk}) k_{l_j}(\kappa R_{jk}) \varphi_{m_j - m_j, m_j - m_j}^{l_j l_j l_j} \right\} = \sqrt{4\pi} \psi_k \delta_{l0} \delta_{m0}, \quad (7)$$

As result, we have the aggregate of N connected infinite systems of linear algebraic equations. The systems contain only the coefficients $B_{lm}^{(k)}$ of external potentials and solve the problem of the interaction of N spheres completely.

3. Ion-electrostatic energy of interaction of two particles and zero approximation for two spheres. Now we consider the problem of interaction of two spheres in detail on the base of general relationships. The line crossing the centers of spheres is taken as the axe z . The shortest distance between spheres we denote as H , and so the distance between centers of spheres is $d = H + a_1 + a_2$. For the *Debye-Huckell* approximation to the double layer free energy $F \equiv F_0$ of a pair interaction of the i -th and the j -th spheres for the known densities of the surface charges can be found using formula (14) in [1]. Hereinafter we take that $i, j = 1, 2; i \neq j$. At constant surfaces' potentials we have to use another relationship

$$F = -\frac{\epsilon_m a_i^2 \Psi_i}{2} \left[\frac{\partial}{\partial r_{i, s_i}} \int \varphi^2(P_i) dS_i \right]_{r_i=a_i} - \frac{\epsilon_m a_j^2 \Psi_j}{2} \left[\frac{\partial}{\partial r_{j, s_j}} \int \varphi^2(P_j) dS_j \right]_{r_j=a_j}. \quad (8)$$

We see that for the determination of the energy the derivatives of potentials are needed.

The potential energy V of the double layer interaction is given by the equality $V = F - F_0$ [2,3], where F_0 is the free energy for two single spheres, and for constant potentials

$$F_0 = -\epsilon_m a_1 \Psi_1^2 (1 + \kappa a_1) - \epsilon_m a_2 \Psi_2^2 (1 + \kappa a_2). \quad (9)$$

Integrating in (8) is executed over the surface of the correspondent sphere, and at constant potentials, integration leads to calculations of the spherical functions integrals

over the total surfaces of the spheres. So, to find the energy of pair interaction, only the first coefficients of series expansions $B_{00}^{(i)}$, $B_{00}^{(j)}$ are needed, but, as the matter of fact, their value is to be determined from the indefinite systems.

In this case, the problem is axis-symmetrical, the spheres are placed on the axis z , the functions $Y_{lm}(\theta, \phi)$ at $\theta = \pi$ have the value $Y_{lm}(\pi, \phi) = \delta_{m0}(-1)^l \sqrt{(2l+1)/(4\pi)}$, and the system for determination of the potentials' coefficients looks like

$$B_{00}^{(i)} k_0(\kappa a_i) + i_0(\kappa a_i) \sum_l B_l^{(j)} (-1)^l (2l+1)^{1/2} k_l(\kappa d) = \Psi_{lm}^{(i)} \delta_{l0} \delta_{m0}, \quad i, j = 1, 2; i \neq j, \quad (10)$$

where $i, j = 1, 2, \quad i \neq j$.

The simplest case takes the place if we keep only one term in the expansions of potentials, i.e. if $l' = m' = 0$ (a zero approximation). Then we have for energy of interaction $V(d)$

$$V(H) = F - F_0 = -\frac{\epsilon_m \Psi_1 \Psi_2}{2\Delta(d)} \left[a_1 (1 + \kappa a_1) \frac{i_0(\kappa a_1)}{k_0(\kappa a_2)} + a_2 (1 + \kappa a_2) \frac{i_0(\kappa a_2)}{k_0(\kappa a_1)} \right] k_0(\kappa d) \quad (11)$$

where $\Delta(d) = 1 - \alpha_0^{(1)} \alpha_0^{(2)} k_0^2(\kappa d)$.

To within terms of higher order of smallness in comparison with the quantity

$$k_0^2(\kappa d) = \frac{\pi^2}{4(\kappa d)^2} \exp(-2\kappa d),$$

we have derived the formula for the energy of interaction

$$V(H) = -\frac{\epsilon_m \Psi_1 \Psi_2 a_1 a_2}{2} \left[\frac{1 + \kappa a_1}{\kappa a_1} (1 - e^{-2\kappa a_1}) + \frac{1 + \kappa a_2}{\kappa a_2} (1 - e^{-2\kappa a_2}) \right] \frac{\exp(-\kappa H)}{H + a_1 + a_2}. \quad (12)$$

For identical spheres when $a_1 = a_2 = a$ and $\Psi_1 = \Psi_2 = \Psi$ from (12) we have the formula

$$V(H) = -\frac{\epsilon_m a \Psi^2 (1 + \kappa a)}{\kappa (H + 2a)} (1 - e^{-2\kappa a}) e^{-\kappa H}. \quad (13)$$

For comparison, *McCartney, Levine* [2] gives the next expression for the energy

$$V_{ML}(H) = \frac{\epsilon_m a \Psi^2 (H + a)}{H + 2a} \ln \left(1 + \frac{a}{H + a} e^{-\kappa H} \right), \quad (14)$$

Expression (14) very likes on the formula of *Hiroyuki Oshima* (see [1]), but under the badge of logarithm we have the sum but no the difference. At $H \ll 2a$ formula (14) is reduced to well-known the *Derjaguin* formula

$$V_D(H) = \frac{\epsilon_m a \Psi^2}{2} \ln(1 + e^{-\kappa H}). \quad (15)$$

At $\kappa H \rightarrow 0$ we get different limits' values from (13) – (15):

$$V \rightarrow \epsilon_m a \Psi^2 \frac{1 + \kappa a}{2\kappa a} (1 - e^{-2\kappa a}), \quad V_{ML} \rightarrow \epsilon_m a \Psi^2 \frac{\ln 2}{2}, \quad V_D \rightarrow \epsilon_m a \Psi^2 \frac{\ln 2}{2}. \quad (16)$$

We see that limits' values of *McCartney, Levine* and *Derjaguin* formulae are coincided, by in our formula the limit is depended on the parameter κa . In both limit's cases at $\kappa a \ll 1$ and at $\kappa a \gg 1$ we have $V = \epsilon_m a \Psi^2 / 2$, so the limit divergence is about 30% in comparison with V_{ML} or V_D .

It should be note, that formula (20) from [1] can be simplify if the expression of Wronski determinant $W(i_0, k_0)$ for the modified spherical Bessel functions

$$W(i_0, k_0) = k_0(z)k_1(z) + i_0(z)i_1(z) = \frac{\pi}{2z^2}$$

is taken into account. After some algebra instead of formulae (20) we have got the simple symmetrical formula

$$V(H) = \frac{16\pi^2 \sigma_1 \sigma_2}{\varepsilon_m} \cdot \frac{a_1^2 a_2^2}{(1 + \kappa a_1)(1 + \kappa a_2)} \cdot \frac{\exp(-\kappa H)}{H + a_1 + a_2} \quad (17)$$

4. Numerical results. We obtain closed formulae consistent with the results of another author in the limit cases, but our results are more general ones and can be improved if the next approximation will be taken into account. Some results of the worked out calculations are presented in Fig. 1-6.

At first, we consider the case of adjusted densities of surfaces charges using results of [1]. We determine dependences of non-dimensional interaction energy $V^* = V/V_0$, where $V_0 = 16\pi^2 a^3 \sigma^2 / (\varepsilon_m (1 + \kappa a))$, for two identical spheres with constant and equal charges versus parameter κH at $\kappa a = 1$ (Fig.1) and at $\kappa a = 4$ (Fig. 2).

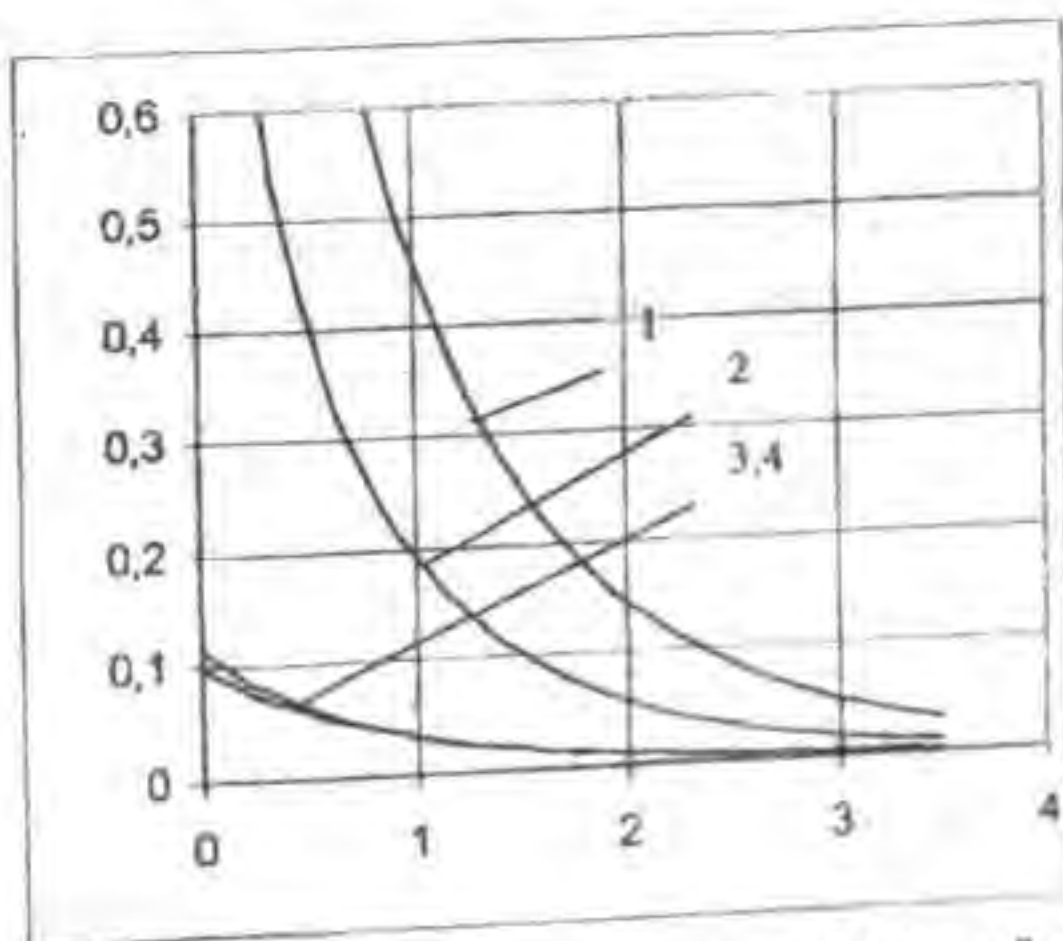
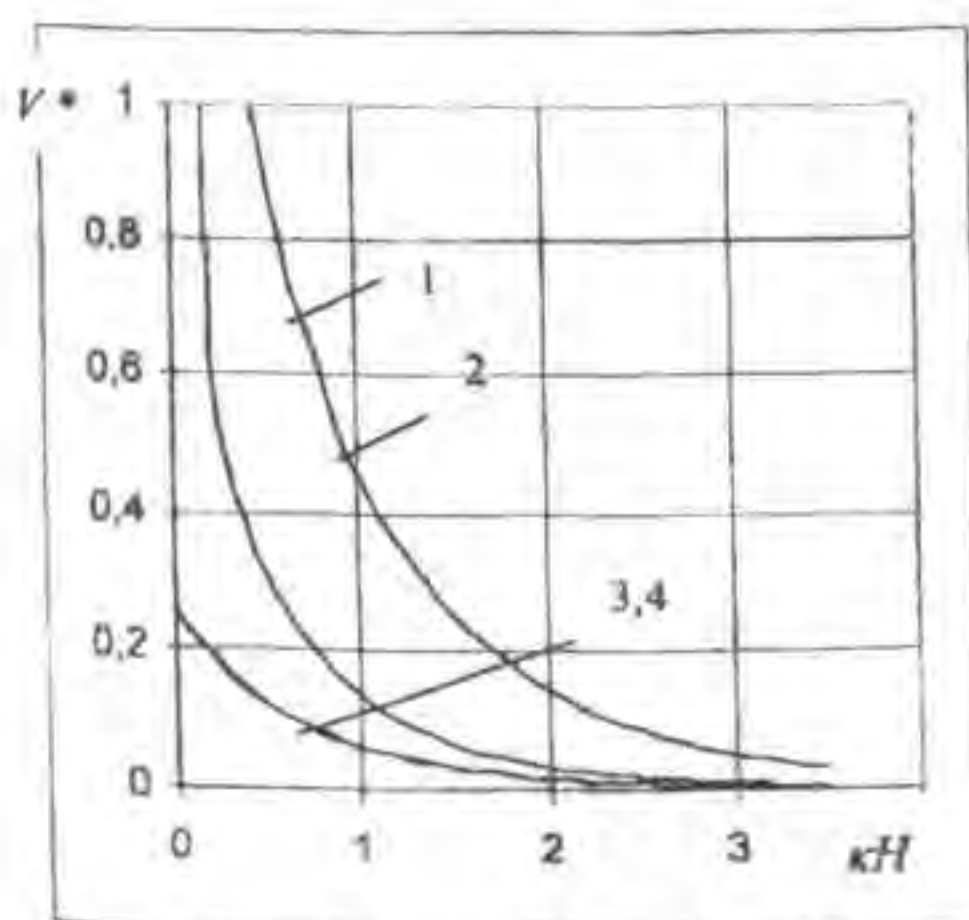


Fig. 1. Interactions' energy $V^* = V/V_0$ of two identical spheres with the constant charges versus κH at $\kappa a = 1$;

Fig. 2. Interactions' energy $V^* = V/V_0$ of two identical spheres with the constant charges versus κH at $\kappa a = 4$;

1 – Derjaguin approximation; 2 – Hiroyuki Oshima approximation; 3 – our simplest zero approximation; 4 – our improved zero approximation.

It follows from this data that at $\kappa H > 3$ formulae Hiroyuki Oshima (24) in [1], and our formulae for zero approximation (simplest (25) and improved (22) in [1]) give the neighbor values, but Derjaguin's formula gives too high value. All the results begin to agree at large values of parameter κH , when $\kappa H > 5$. The results from formulae (25) in [1] and (22) in [1] differ slightly and only at small values of the parameter κH . If values $\kappa H < 1$, our results strongly differ from results of Hiroyuki Oshima and Derjaguin, especially at very small values of κH , because and $V_D \rightarrow \infty$ and $V_{HO} \rightarrow \infty$, when $\kappa H \rightarrow 0$.

Further we consider the case of adjusted densities of surfaces potentials and compare the formula *McCartney, Levine* (14) and our one (13). Results of calculations are presented in Fig. 3,4 for the little value $\kappa a = 0.5$ and the large value $\kappa a = 5$ correspondently.

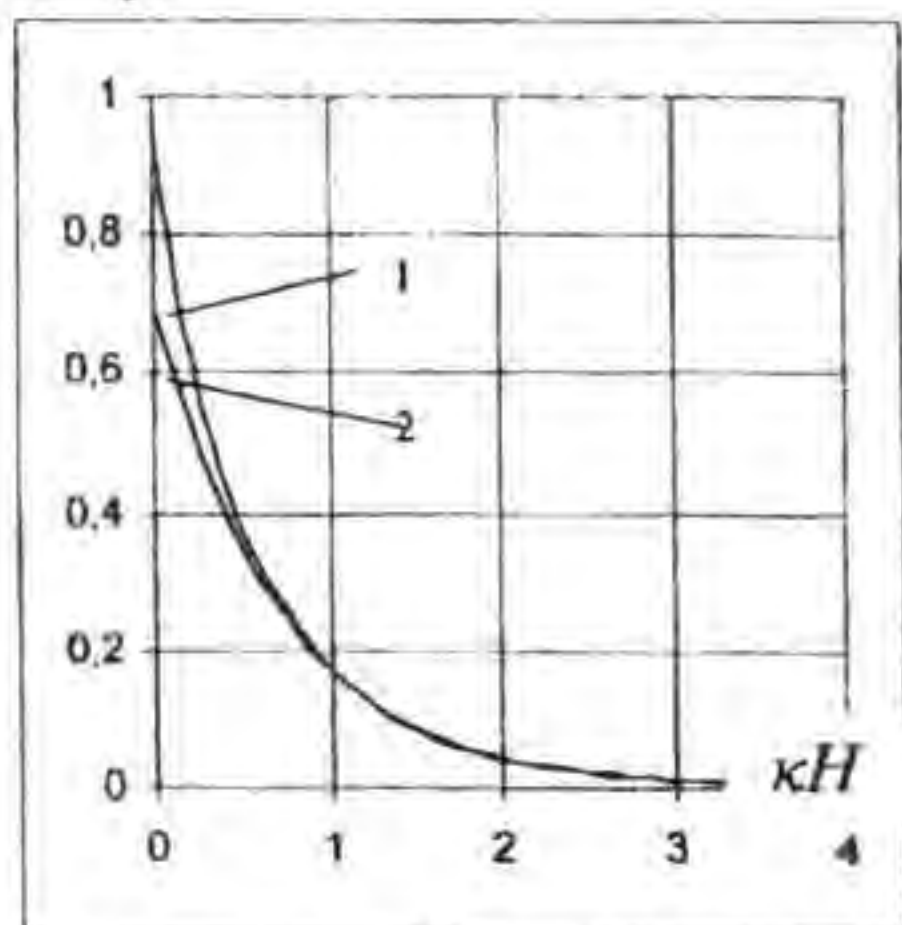


Fig. 4. Dependence of energy interactions of two identical spheres with constant potentials $V^* = V / (\epsilon_m a \Psi^2)$ for $\kappa a = 0.5$;

1 – *McCartney, Levine* approximation; 2 – our simplest zero approximation.

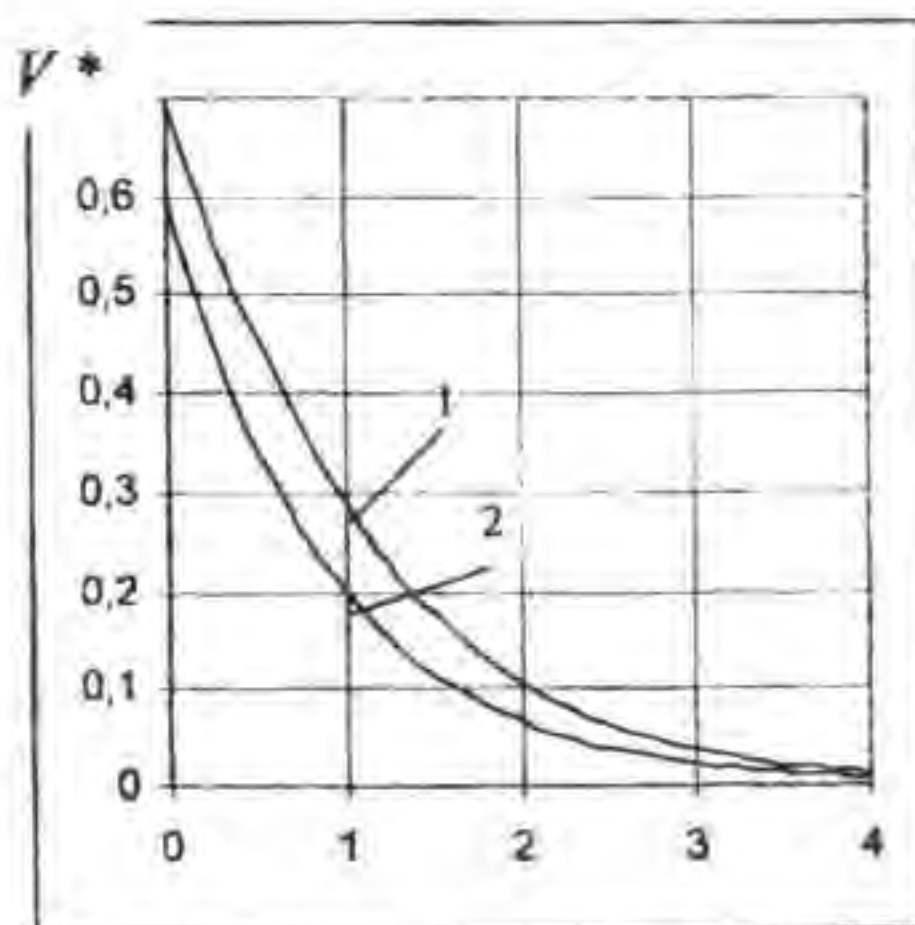


Fig. 5. Dependence of energy interactions of two identical spheres with constant potentials $V^* = V / (\epsilon_m a \Psi^2)$ for $\kappa a = 5$;

From presented curves we see that at small values parameter κa the difference between results is smaller than at large values parameter. In a hole results are with a good agreement for small values κa at $\kappa H > 0.5$ and for large values κa at $\kappa H > 3$.

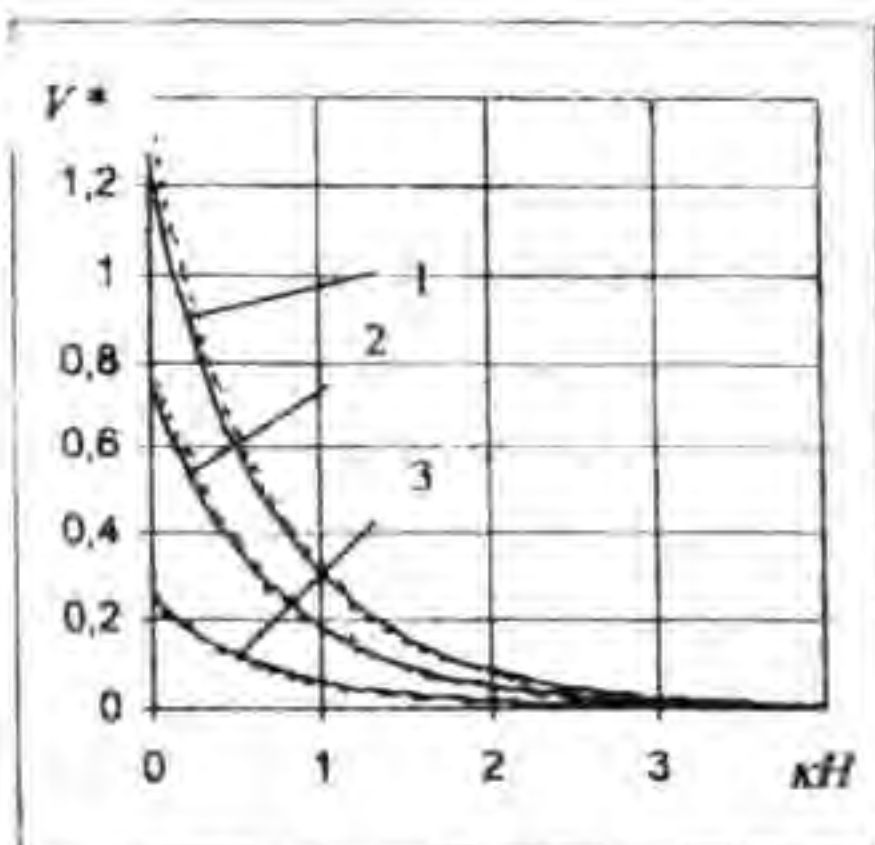


Fig. 5. Interactions' energy $V^* = V / V_0$ of two identical spheres with identical radii but the different charges versus κH at $\kappa a = 1$;

1 – $q = 1$; 2 – $q = 3$; 3 – $q = 5$ ($q = \sigma_2 / \sigma_1$).

— our simplest zero approximation; ———— our improved zero approximation.

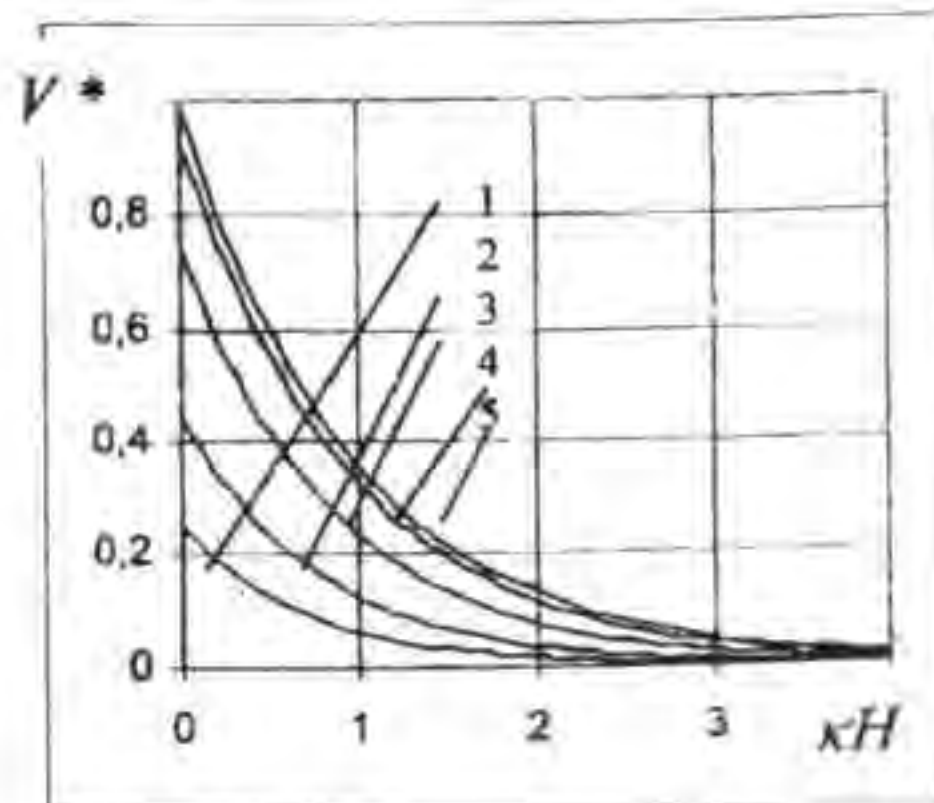


Fig. 6. Interactions' energy $V^* = V / V_0$ of two spheres with identical charges but the different radii versus κH at $\kappa a = 1$; 1 – $p = 1$; 2 – $p = 2$; 3 –

$p = 6$; 4 – $p = 24$; 5 – $p = 120$ ($p = a_2 / a_1$).

Results of some calculations using the formula of zero approximation (15) are presented in Fig. 5, 6. Two particular cases are considered. At first, we assume that radii are equal ($a_1 = a_2 = a$), but charges are different (Fig. 5), and the ratio $q = \sigma_2 / \sigma_1$ was varied; in the second case, we assume that the charges are equal ($\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$), but radii

are different (Fig. 6), and ratio $p = a_2 / a_1$ was varied. The value $\kappa a = 1$ was adopted in these cases. In the first case we use $V_0 = 16\pi^2 a^3 \sigma_1^2 / (\epsilon_m (1 + \kappa a))$, and in the second case $V_0 = 16\pi^2 a_1^3 \sigma^2 / (\epsilon_m (1 + \kappa a_1))$.

The data show that results obtained from the improved zero approximation and the simplest zero approximation, begin to differ at values $\kappa H \ll 1$. For example, at $\kappa a = 10$ the maximum distinction is about 30% in the case if charges have the same signs at $H = 0$ and $q = 5$. At large values q and large values $\kappa a = 10$ it is necessary to use the improved zero approximation.

In the second case when $a_2 / a_1 \gg 1$ the value of energy trends to a limit one. The value can be founded from limit transition in (20) from [1].

5. Conclusion. The exact solution for interaction of a system of small spherical particles in electrolyte is obtained. On the base of the exact solutions the handily closed formulae for calculating ion-electrostatic energy of two spheres are derived. Our results correspond to the results of another authors in simple cases and generalize ones in range of small values parameter $\kappa H < 2$. In [1] and this paper we consider the case when densities of surfaces' charges or surfaces' potentials are given.

Calculations realized show the high effectiveness of our method. It should be marked that the formulae found can be improved if next terms are taken into account in series for potentials. It opens the opportunity to calculate the potential energy of arbitrary number of particles with great accuracy. Moreover, at insignificant modification using previously elaborated algorithms [4, 5] we can take into account a lamellar structure of particles. This circumstance is important when calculating interactions' energy of mineral particles with different biological objects, for example, with cells.

Literature

1. Grechko L.G, Lerman L.B, Pokotylo O.Ya., Shkoda N.G. Ion-electrostatic interaction of small spherical particles in an electrolyte solution. Part I. Definition of interaction free energy with known densities of surfaces' charges // Bulletin of Kyiv University. - Series: Physics & Mathematics. - 2005, this bulletin.
2. McCartney L.N., Levine S. // J. of Colloid and Interface Sci.. An improvement on Derjaguin's Expression at Small potentials for the Double Layer Interactions Energy of Two Spherical Colloidal Particles. - 1969. - V. 30, No 3. - P. 345-354.
3. Grechko L.G, Lerman L.B, Shkoda N.G. Scattering of electromagnetic waves on multilayered sphere // Bulletin of Kyiv University. - Series: Physics & Mathematics. - 2004, No 3. - S. 376-385 (*In Ukraine*).
4. L. B. Lerman, L. G. Grechko, V. V. and Gozhenko, Electromagnetic waves interaction with a lamellar spherical lens. - Proceedings of the 5th International Conference on Antenna Theory and Techniques. Kyiv: National technical university 'KPI'. - 2005). - 234-237.

Надійшла до редакції 26.10.2005.

УДК 539.192:519.41

Микола Є. Корнієнко¹,
Антоніна П. Науменко²

Спектри комбінаційного розсіяння другого порядку одностінних вуглецевих нанотрубок

Порівняні форми коливальних смуг спектрів комбінаційного розсіяння 1-го та 2-го порядків одностінних вуглецевих нанотрубок при зміні частоти збуджуючого лазерного випромінювання ν_L . Встановлена сильна залежність інтенсивностей обертонів від ν_L та аномалії ангармонізму; сильна залежність від ν_L та зростання ангармонізму для D моди і зменшення – для G моди. Вперше спостерігалась смуга сумарного тону $\nu_D + \nu_G$ з вираженою тонкою структурою. Зарєстровані смуги обертонів вузьчі за основі смуги. Порівнюються форма низькочастотної моди нанотрубок $\sim 160 \text{ cm}^{-1}$ та сумарного тону $\nu_G + \nu_R$. Закономірності, що спостерігаються в спектрах, пояснюються ефектами фонон-електронної взаємодії та зміною електронних станів нанотрубок, а також близькістю до резонансних умов збудження спектрів КРС.

Ключові слова: комбінаційне розсіяння світла, обертон, одностінні вуглецеві нанотрубки.

¹ E-mail: nikkorn@univ.kiev.ua

² E-mail: a_naumenko@univ.kiev.ua

Mykola E. Korniyenko¹,
Antonina P. Naumenko²

Second order Raman spectra of single-wall carbon nanotubes

The shapes of vibrational bands in 1-st and 2-nd order Raman spectra of single-wall carbon nanotubes are compared at the change of the frequency of laser excitation ν_L . Strong change of overtones band intensity with increasing of and the anomaly of unharmonicity; strong dependence from ν_L , increasing of unharmonicity for D mode and decreasing one for G mode is observed. For the first time sum-tone band $\nu_D + \nu_G$ with the expressed fine structure was observed. It is established, that overtone bands are narrower the main bands. The shape of low-frequency mode of swnt- 160 cm^{-1} is compared with shape of sum tone $\nu_G + \nu_R$. Observed peculiarities are explained by effects of phonon-electronic interaction and change of electronic states, and also closeness to resonant conditions of excitation of Raman spectra.

Key Words: Raman scattering, overtone, single-wall carbon nanotubes.

Вступ

Останнім часом інтенсивно досліджуються нанокристали та наночастинки різного хімічного складу. Це пов'язано з розвитком наноелектроніки та активним використанням цих частинок в якості каталізаторів різноманітних хімічних процесів. В наночастинках 50-90% атомів є поверхневими, а в нанотрубках та фулеренах їх частка зростає до 100%. У зв'язку з цим вивчення їх фізичних і в першу чергу спектральних властивостей має значний науковий інтерес. На сьогодні дослідженню

коливальних спектрів вуглецевих нанотрубок присвячено досить багато робіт [1–3]. Для дослідження низькочастотних та високочастотних коливальних мод успішно використовується спектроскопія спонтанного комбінаційного розсіяння (КР) світла. Однак при вивченні спектрів КР нанотрубок ще мало уваги приділяється дослідженню спектрів 2-го та більш високих порядків. Разом з тим, вони містять важливу додаткову інформацію, зокрема, по ангармонізму коливальних мод, що надає можливість більш глибоко вивчати властивості та структуру вуглецевих матеріалів, що досліджуються. В даній роботі детально досліджені коливальні смуги одностінних вуглецевих нанотрубок (ОВНТ) в області обертонів D і G мод близько 2690 і 3170 см^{-1} , а також сумарних тонів $\nu_D + \nu_G$ та $\nu_G + \nu_R$ з участю низькочастотної «дихаючої» моди вуглецевих нанотрубок $\nu_R \sim 160\text{ см}^{-1}$. Це дозволило оцінити ангармонізм різних коливальних мод. Вперше встановлена залежність ангармонізму коливальних G і D мод від довжини хвилі збуджуючого випромінювання λ_L . При цьому виявилось, що ангармонізм D моди збільшується із зростанням частоти збудження лазера, а ангармонізм G моди – несподівано зменшується.

1. Експериментальна методика

Спектри комбінаційного розсіяння збуджувались випромінюванням неперервного Ar^+ лазера із довжинами хвиль λ_L 514,5; 488 і 476,5 нм та потужністю ~ 50 мВт. Виділення необхідної довжини хвилі генерації лазера здійснювалось за допомогою призми, розташованої поза лазерним резонатором. Реєстрація спектрів проводилась на автоматизованому подвійному монохроматорі ДФС-24, оснащеному охолоджуванним фотопомножувачем та реєстраційною схемою, яка працює в режимі підрахунку фотонів. Через відносно малий переріз КР вуглецевих матеріалів для підвищення достовірності одержуваної інформації застосовувались додаткові міри по мінімізації шумів. Зокрема, для збільшення рівня сигналу виставлялись відносно великі спектральні ширини щілин $\sim 3\text{--}5\text{ см}^{-1}$ і накопичування сигналу, а також застосовувалось оптимальне чисельне згладжування спектрів з варійованим спектральним вікном.

2. Обертони та сумарний тон високочастотних G і D мод

На відміну від інших робіт, де досліджувалась структура G смуги в спектрі КР ОВНТ, ми розглядаємо структуру фундаментальних смуг одночасно зі структурою як їх обертонів $2\nu_G$ і $2\nu_D$, так і сумарних тонів $\nu_G + \nu_D$ і $\nu_G + \nu_R$. Загальний вигляд спектрів КР в області смуг 2-го порядку при використанні збуджуючого випромінювання різних довжин хвиль показаний на рис.1. Видно, що в спектрах окрім обертонів $2\nu_D$ і $2\nu_G$ спостерігаються також слабкі смуги сумарного тона $\nu_D + \nu_G$. Із зростанням

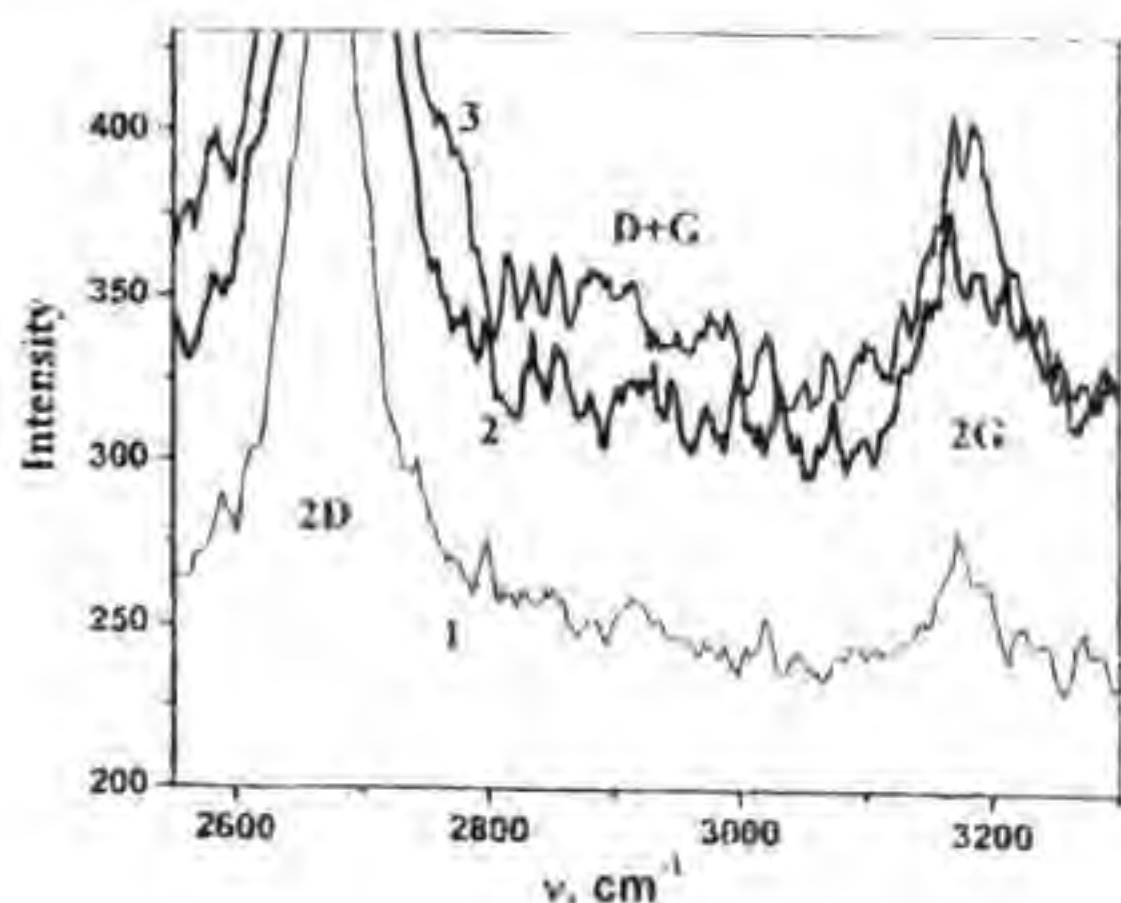


Рис.1. Фрагменти спектрів КР в області смуг 2-го порядку при збудженні 514,5 (1), 488 (2) та 476,5 нм (3).

основних смуг G смуга значно інтенсивніша D смуги. В цій роботі ми порівнюємо форми фундаментальних смуг та їх обертонів. З причини значної різниці інтенсивностей вони нормувалися на максимум інтенсивності. Відмітимо також, що максимум обертону $2\nu_D$ як і D смуги із зростанням ν_L зсувається у високочастотний бік, а для відповідних смуг G моди – у низькочастотну сторону.

Порівняння форм фундаментальних ν_D і ν_G смуг та їх обертонів $2\nu_D$, $2\nu_G$ у випадку $\lambda_L = 476,5$ нм показано на рис. 2а,б. Для цього частоти в спектрах першого порядку збільшувались у два рази. У результаті ангармонізму максимум смуги обертону $2\nu_D$ зміщений у бік менших частот. У зв'язку з цим розрахована частота обертону зміщена на 14 cm^{-1} у низькочастотний бік до суміщення максимумів смуг. Разом з тим максимумами розрахованої та експериментально зареєстрованої смуг обертону $2\nu_G$ фактично співпадають без урахування ангармонічного зсуву. Це показує, що ангармонізми G і D смуг суттєво відрізняються, що і буде розглядатися нижче.

Як відомо, для вуглецевих нанотрубок в G моди замість одиночної смуги графітових матеріалів $E_{2g} \sim 1582\text{ cm}^{-1}$ з'являється дублет $1570\text{--}1592\text{ cm}^{-1}$. Зазначимо, що у смузі обертону $2G$, не зважаючи на ймовірну наявність тонкої структури, не виражена друга низькочастотна компонента $2 \times 1570\text{ cm}^{-1}$ G-смуги. Смуга обертону $2D$ суттєво вужча за основну D-смугу, а тонка структура в ній виражена значно слабкіше. Вузькість смуг обертонів та відсутність в обертоні $2\nu_G$ двох або трьох чітких компонент зі спектральним інтервалом $\sim 22\text{ cm}^{-1}$ має бути використано при інтерпретації тонкої структури смуг.

частоти лазерного збудження ν_L зростає як інтенсивність обертонів, так і інтенсивність широкосмугового фону, але фундаментальні смуги практично не змінюються. Широкосмуговий фон в границях усіх досліджуваних смуг наближався лінійною або квадратичною функцією та віднімався з КР спектрів. Інтенсивність дозволеної смуги обертону $2\nu_D$ суттєво більша за інтенсивність фундаментальної D смуги ν_D . Відмітимо, що інтенсивність обертону $2\nu_D$ перевищує також інтенсивність обертону $2\nu_G$, хоча в області

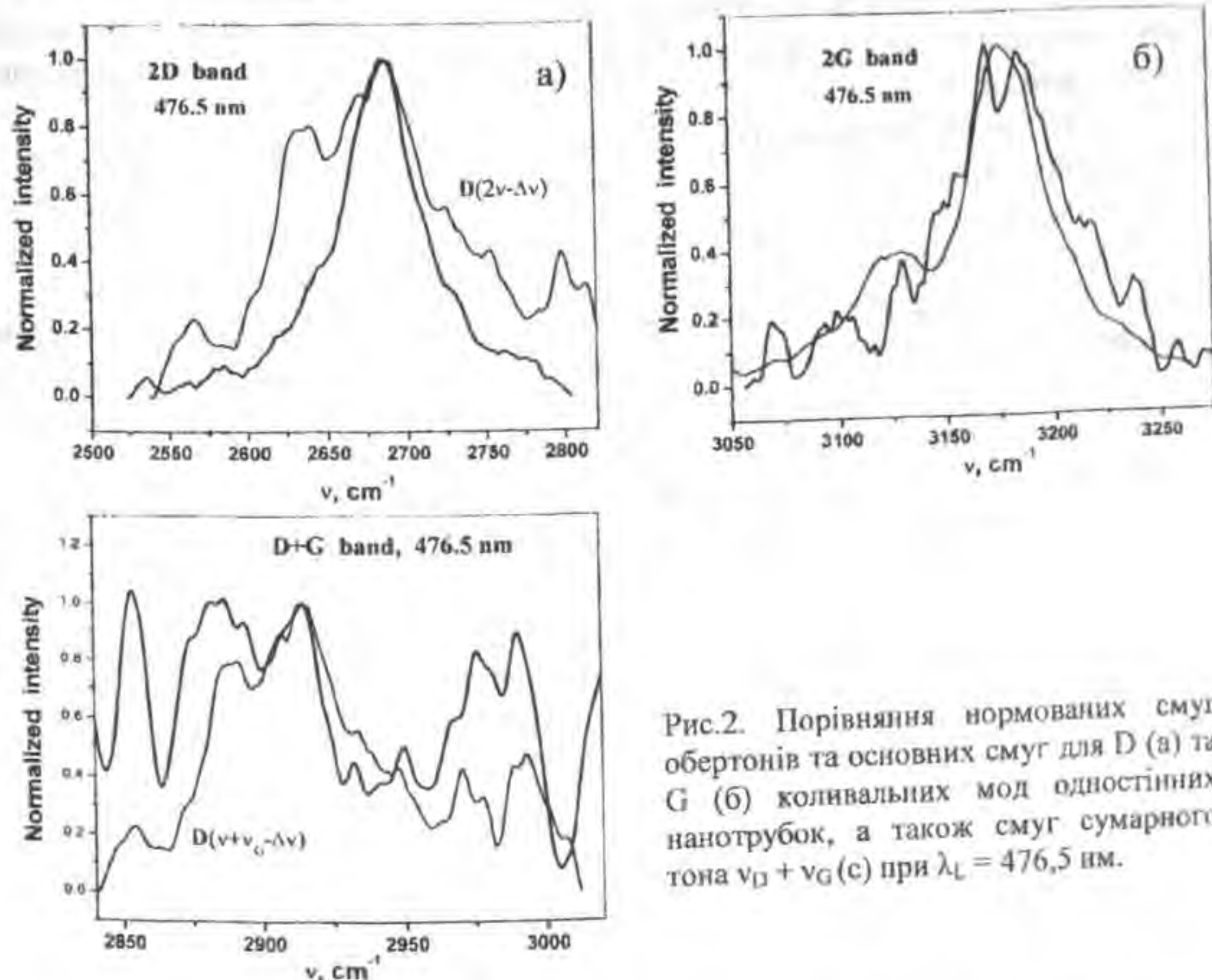


Рис.2. Порівняння нормованих смуг обертонів та основних смуг для D (а) та G (б) коливальних мод одностінних нанотрубок, а також смуг сумарного тону $\nu_D + \nu_G$ (с) при $\lambda_L = 476,5 \text{ nm}$.

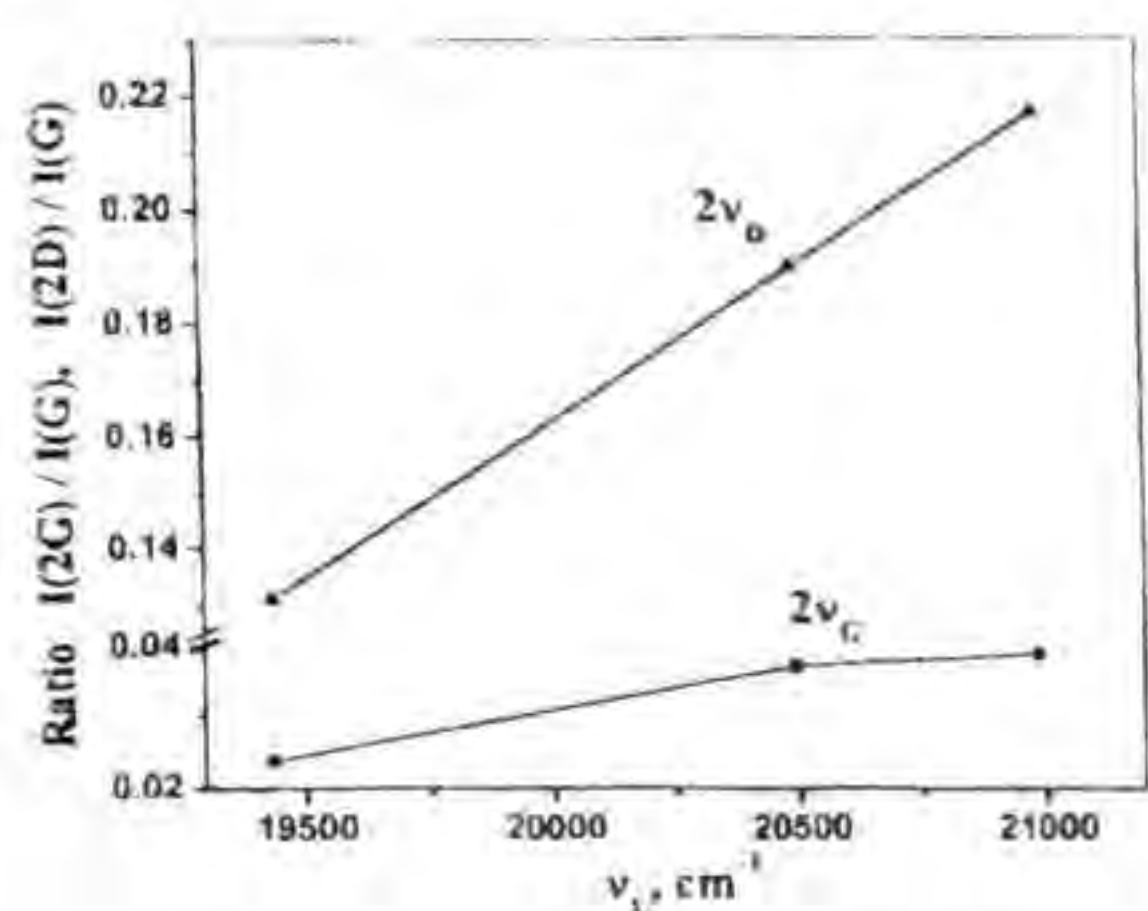
У зв'язку з вузьким максимумом G смуги в спектрі сумарного тону $\nu_D + \nu_G$ повинна проявитися в основному складна структура широкої D смуги, що зміщена у високочастотний бік на $\nu_D = 1588-1592,5 \text{ cm}^{-1}$. Порівняння тонкої структури сумарного тону та зсунутої D смуги показано на рис.2с. Для співпадання особливостей тонкої структури смуг, що розглядаються, смугу D внаслідок наявності ангармонізму треба знову зсунути у низькочастотний бік на $\Delta\nu = 24 \text{ cm}^{-1}$. При цьому всі компоненти тонкої структури обох смуг дуже добре співпадають, що говорить на користь хорошої якості записаних спектрів навіть для найбільш слабких смуг сумарного тону D+G. Видно, що в спектрі цього тону сильно зростає інтенсивність низько- та високочастотних компонент, що є характерним для резонансного КР і може бути пов'язано із вкладом sp^3 гібридизації електронних станів атому вуглецю.

3. Аномальні зміни інтенсивностей і ангармонізму коливальних мод одностінних вуглецевих нанотрубок

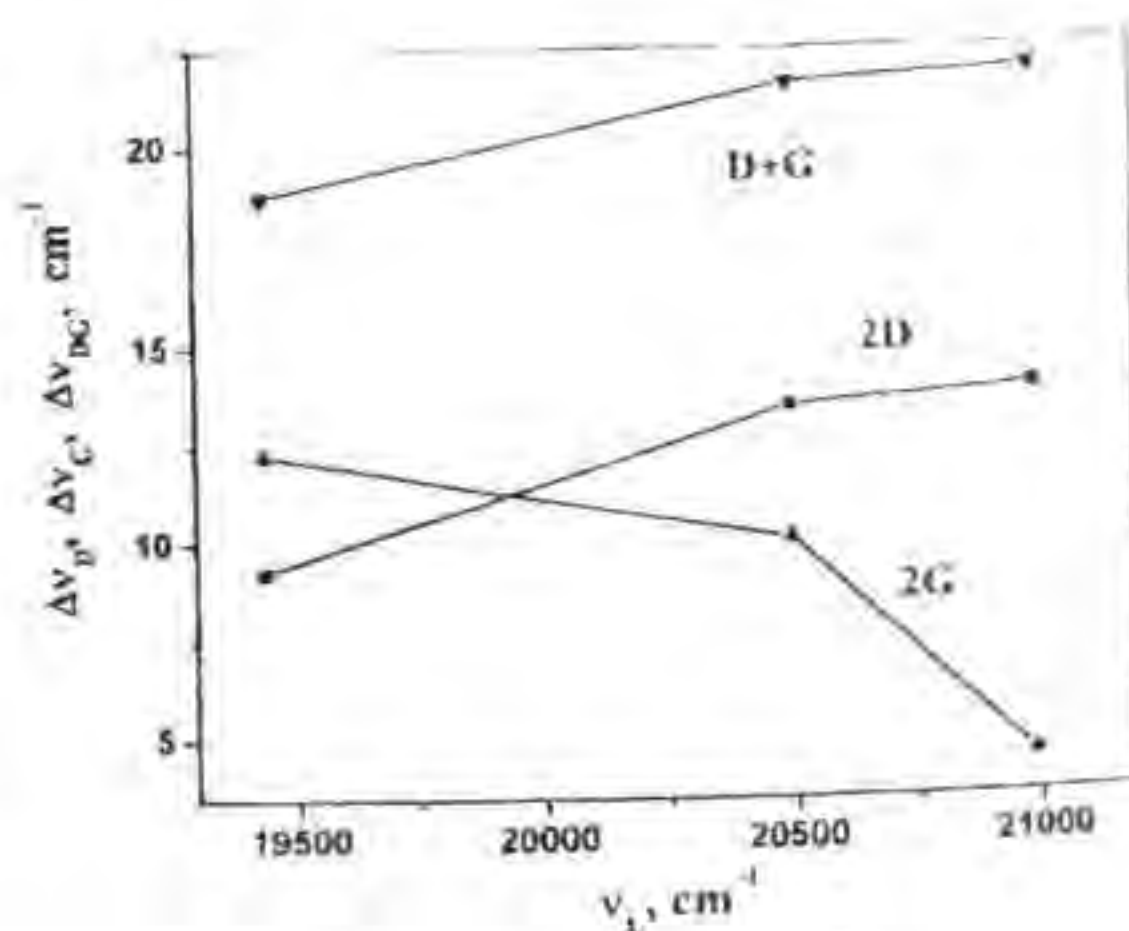
Ми порівняли інтенсивності смуг обертонів з інтенсивністю G смуги, яка більш слабо залежить від частоти збудження. Із результатів, що показані на рис.3а, видно, що інтенсивність обертону $2\nu_D$ лінійно зростає з ростом частоти збудження ν_L і суттєво перевищує зростання

обертону $2\nu_G$. Це також говорить на користь резонансного механізму розсіяння для D смуги, коли спостерігається багато смуг обертонів значної інтенсивності [4].

Величину ангармонізму коливальних мод можна характеризувати різницями розрахованих частот зі смуг 1-го порядку та експериментально зареєстрованими положеннями максимумів смуг у спектрах 2-го порядку: $\Delta\nu_{D,G}=2\nu_{D,G}-\nu(2D,2G)$ та $\Delta\nu_{DG}=\nu_D+\nu_G-\nu(D+G)$. Залежності величин $\Delta\nu_{D,G}$ і $\Delta\nu_{DG}$ від ν_L показані на рис.3б. Легко бачити, що найбільший ангармонізм спостерігається для сумарного тону $\nu_D+\nu_G$. У випадку найбільш довгохвильового збудження λ_L , яке ми використовували, ангармонізм графітової G моди більший за ангармонізм D моди. Однак при наближенні ν_L до умов резонансу ангармонізм D моди і сумарного тону зростає, а для G моди – зменшується. Тобто жорсткість структури нанотрубок для G моди зростає, а для D моди – зменшується. Аномальними є як сильні залежності ангармонізму від довжини хвилі збудження λ_L , так і різна поведінка величин ангармонізму для різних коливальних смуг. В результаті збільшення жорсткості для G моди із зростанням ν_L величина $\Delta\nu_{DG}$ зростає повільніше у порівнянні з $\Delta\nu_D$.



а)



б)

Рис.3. Зростання співвідношення інтенсивностей смуг обертонів $2\nu_D$ і $2\nu_G$ в спектрі КР одностінних вуглецевих нанотрубок (а) та різниць розрахованих за значеннями смуг 1-го порядку та експериментально зареєстрованих частот в спектрах 2-го порядку (б) від частоти збуджуючого лазерного випромінювання ν_L .

Такі несподівані зміни ангармонізму можна пояснити суттєвими змінами основного електронного стану при резонансному збудженні. В умовах, близьких до електронного резонансу, основний стан змінюється таким чином, що жорсткість структури для G моди зростає, а для D моди та сумарного тону – зменшується. Виявлена поведінка ангармонізму для D моди узгоджується з поведінкою коливальних мод, хоча така кореляція є характерною для ІЧ спектрів поглинання. Як відомо, в ІЧ спектрах величина поглинання для обертонів визначається величиною

ангармонізму. В спектрі КР величина інтенсивності визначається похідною поляризованості по коливальній координаті $(d\alpha/dq)^2$. Із збільшенням ангармонізму зростає і зміна поляризованості для D моди, що вказує на зростання внеску sp^3 гібридизації. Для G моди ослаблення ангармонізму із зростанням ν_L супроводжується невеликим зростанням $(d\alpha/dq)^2$.

Зміна електронного стану вуглецевих нанотрубок може бути пов'язана з ефектами сильної фонон-електронної взаємодії в умовах більш сильного збудження фононної підсистеми при наближенні до резонансу. Це аналогічно ефектам сильної фонон-електронної взаємодії при наближенні до температури плавлення [5].

4. Сумарний тон із участю низькочастотної моди вуглецевих нанотрубок.

Для вуглецевих нанотрубок в спектрах КР спостерігається низькочастотна коливальна мода ν_R , яка відповідає радіальним коливанням атомів в поперечному перерізі трубки і залежить від її діаметру [3]. Інтенсивність КР смуги ν_R суттєво збільшується з ростом частоти збуджуючого випромінювання. Це може бути пов'язано як з наближенням до резонансних умов збудження КР спектрів, що підтверджується зростанням інтенсивності D смуги, а також смуг обертонів $2\nu_D$ і $2\nu_G$, так і з ростом електронної поляризованості в результаті зміни електронних станів. Останнє підтверджується також зростанням інтенсивності широкосмугового фону в спектрах КР, що частково видно з рис.1. На зміну електронних станів може вказувати і зростання інтенсивності крила Релея з ростом частоти збуджуючого лазерного випромінювання.

Основна низькочастотна мода ν_R проявляється також в області сумарної і різницевої частоти $\nu_G \pm \nu_R$ біля інтенсивної G смуги. В даній роботі ми розглядаємо тільки смугу сумарного тону, оскільки вона значно інтенсивніша різницевої смуги. Представляє інтерес порівняння нормованих форм низькочастотної смуги $\nu_R \sim 160 \text{ cm}^{-1}$ і смуги сумарного тону $\nu_G + \nu_R$ близько 1750 cm^{-1} . Для цього з частот сумарної смуги віднімалась частота $\nu_G \sim 1588-1592 \text{ cm}^{-1}$, аналогічно тому як це робилося для смуги $\nu_D + \nu_G$. Результати порівняння нормованих смуг при двох довжинах хвиль збуджуючого випромінювання представлені на рис.4а,б. Перш за все слід відзначити, що з ростом частоти збудження ν_L частота низькочастотної моди ν_R зменшується аналогічно G моді. Суттєво також, що при $\lambda_L = 514,5 \text{ nm}$ максимуми смуг, що порівнюються, практично співпадають, що вказує на малу величину відповідного ангармонізму.

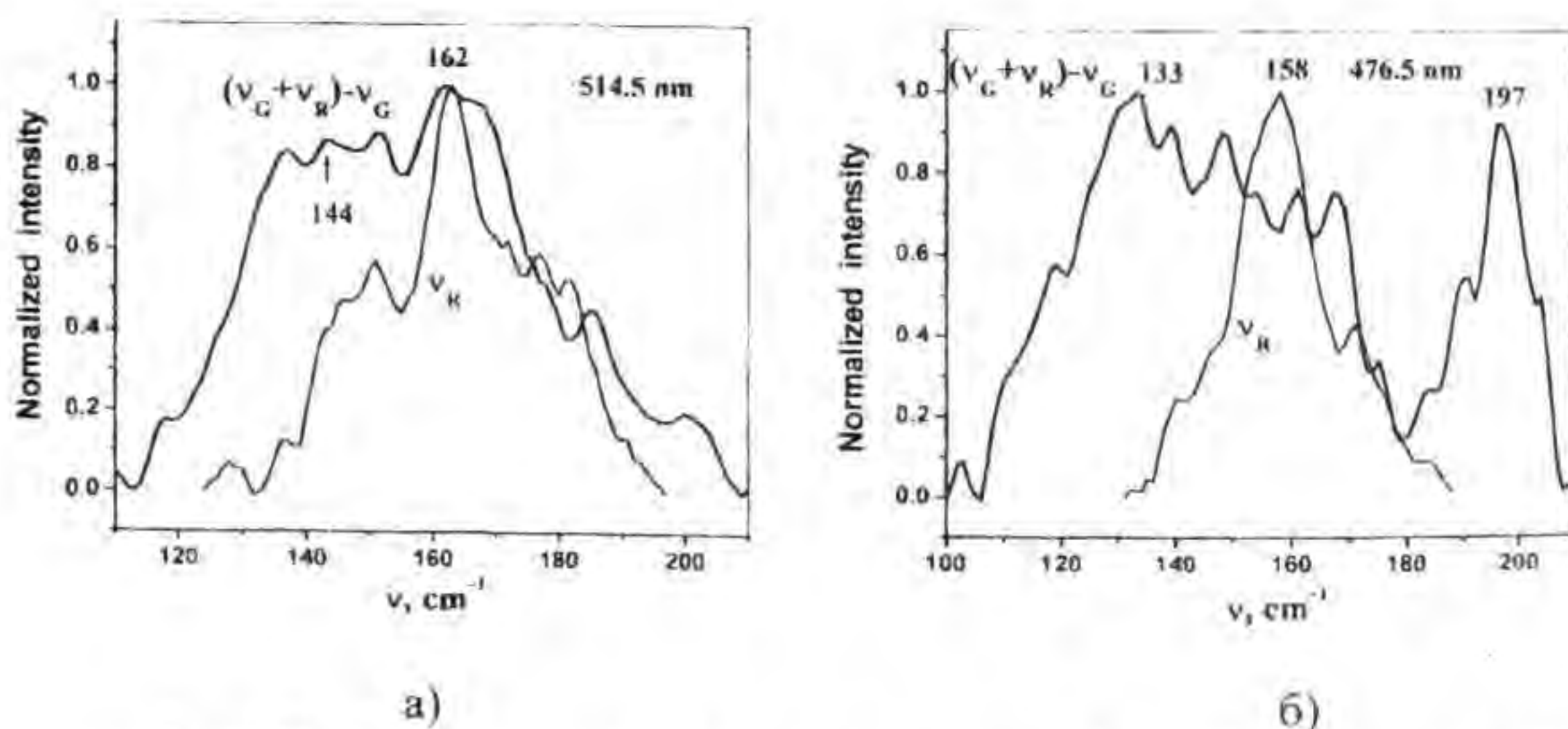


Рис.4. Порівняння нормованих смуг низькочастотної моди і сумарного тону $\nu_G + \nu_R$ при $\lambda_i = 514.5$ нм (а) і 476,5 нм (б).

На відміну від розглядуваних вище смуг обертонів, смуга сумарного тону $\nu_G + \nu_R$ значно ширша в порівнянні з низькочастотною смугою. На нашу думку це пов'язано з вираженою дублетною структурою G смуги, яка проявляється і в розглядуваному сумарному тоні. Це підтверджується такою ж величиною спектрального інтервалу між двома спостережуваними максимумами і аналогічним розподілом інтенсивностей компонент дублету. Більш детально структура всіх спостережуваних смуг буде розглянута в окремій публікації.

У випадку використання для збудження КР спектрів більш короткохвильового випромінювання 476,5 нм аналогічно D смузі і сумарному тону $\nu_D + \nu_G$ (рис.2в) спостерігається ускладнення смуги сумарного тону $\nu_G + \nu_R$, що показано на рис.4б. При цьому більш сильно зростає інтенсивність низькочастотної компоненти сумарного тону в області 1720 cm^{-1} , якій відповідає компонента 133 cm^{-1} в зміщеному спектрі порівняння. Крім того появляється високочастотна компонента 197 cm^{-1} , що може сильно ускладнити визначення величини ангармонізму. Але розраховане положення зміщеної високочастотної компоненти G дублету по положенню близьке до низькочастотної смуги $\nu_R = 158 \text{ cm}^{-1}$, що вказує на малу величину ангармонізму.

Висновки

1. Виявлено вплив непервного короткохвильового лазерного випромінювання на структуру і властивості вуглецевих нанотрубок. Це підтверджується значним зростанням інтенсивностей смуг обертонів $2\nu_G$ і $2\nu_D$, а також низькочастотної радіальної моди ν_R з ростом енергії збуджуючих фотонів. Інтенсивність смуги $2\nu_D$ при збудженні

випромінюванням 476,5 нм зростає приблизно в 1,7 рази в порівнянні зі збудженням 514,5 нм, в той час як інтенсивність G смуги змінюється мало. Випромінювання 476,5 нм приводить також до зростання деяких компонент в структурі D смуги, і особливо смуг сумарних тонів $\nu_D + \nu_G$ і $\nu_G + \nu_R$.

2. Встановлена аномальна поведінка ангармонізмів різних коливальних мод одностінних вуглецевих нанотрубок. Це проявляється як в сильній залежності величин ангармонізмів від довжини хвилі збуджуючого випромінювання, так і в протилежній поведінці ангармонізму для різних коливальних смуг. З ростом частоти збуджуючого лазерного випромінювання жорсткість структур нанотрубок для G моди зростає, а для D моди – зменшується. Для сумарного тону $\nu_D + \nu_G$ величина ангармонізму максимальна, а для складеного тону $\nu_G + \nu_R$ з участю низькочастотної моди – незначна.

3. Зміни ангармонізму свідчать про помітну трансформацію основного електронного стану в умовах резонансного збудження. Ці зміни можуть бути викликані сильною фонон-електронною взаємодією для проміжних структурних форм вуглецю при наявності вкладів sp^2 і sp^3 гібридизації.

4. Встановлено, що смуги обертонів $2\nu_D$ і $2\nu_G$ помітно вужчі відповідних фундаментальних смуг. Причому в смузі обертону $2\nu_G$ не виражена дублетна структура наявна в основній смузі. В широкій смузі сумарного тону $\nu_D + \nu_G$ в основному проявляється складна тонка структура D смуги, а в сумарній смузі $\nu_G + \nu_R$ з участю низькочастотної моди $\nu_R \sim 160 \text{ cm}^{-1}$ спостерігається дублетна структура G смуги.

Література

1. M.Lamy de la Chapelle et al. Raman studies of singlewalled carbon nanotubes elaborated by electric arc discharge technique.// Science and Technology of Nanomaterials. – 1999. – 1. – с. 279-285.
2. M.S.Dresselhaus et al. Single Nanotube Raman Spectroscopy//Ac. Chem.Res.– 2002.– 35. p.1070–1078
3. Jorio A. et al. Structural determination of isolated single wall carbon nanotubes by resonant Raman scattering. //Phys. Rev.Lett. – 2001. – 86. – p.1118–1121
4. Мартин Р.М., Фаликов Л.М., Резонансное комбинационное рассеяние света, В кн. Рассеяние света в твердых телах, под ред. М.Кардоны, М., Мир, 1979, С. 101-173.
5. Корнієнко М.Є., Про зв'язок теплот плавлення кристалів з енергіями оптичних фононів// Вісник Київського університету, Серія: фізико-математичні науки.- 2004.- № 4- с.466-476.

Надійшла до редакції 03.11.2005

УДК 519.9

Макара В.А., зав. кафедри фізики металів,
Стебленко Л.П., старший науковий співробітник,
Курилюк А.М., аспірантка,
Оглобля В.І., доцент,
Кольченко Ю.Л., інж. I кат.,
Науменко С.М., провідний інженер

Вплив радіаційного опромінення на магніто механічний ефект та характер його релаксації

В роботі досліджуються ефекти зміни мікротвердості в кристалах кремнію, які обумовлені комбінованою дією слабого постійного магнітного поля та опромінення γ -квантами від радіоактивного джерела ^{207}Bi . Було виявлено, що комбінований вплив магнітної та радіаційної обробки позначається на величині і характері релаксації магніто механічного ефекту. Одержані в роботі результати пов'язуються з модифікацією дефектної структури кристалів кремнію.

Ключові слова: кремній, мікротвердість, радіаційне опромінення, γ -кванти, магнітне поле, магніто механічний ефект, релаксація.

E-mail: yu_l_kolchenko@univ.kiev.ua

V. A. Makara, head of the physics of metals department,
L. P. Steblenko, senior research worker,
A.M. Kurylyuk, post-graduate student,
V.I. Ogloblya, docent,
Yu. L. Kolchenko, engineer,
S. M. Naumenko, principal engineer

The influence of radiation treatment in magnetomechanical effect and character of its relaxation

The modification effects of microhardness in silicon crystals caused by the combined action of the weak fixed magnetic field and irradiation by γ -quanta from radiation source ^{207}Bi have been analyzed. It has been shown that the combined action of magnetic and radiation treatment influences the magnitude and character of relaxation of magnetomechanical effect. The obtained results have been associated with modification the structure of silicon crystals.

Key Words: silicon, microhardness, radiation treatment, γ -quanta, magnetic field, magnetomechanical effect, relaxation.

В останні роки надзвичайно актуальною стала проблема впливу електронних спінів, локалізованих на дефектах кристалічної решітки, на пластичні та інші властивості кристалів [1, 2]. Інтенсивно розвиваються фундаментальні уявлення про управління елементарними фізичними і хімічними процесами в твердих тілах за допомогою переорієнтації спінів частинок в магнітному полі (МП).

Хоча про різноманітні процеси розриву і утворення нових хімічних зв'язків при пластичному деформуванні твердих тіл було відомо давно, можливість впливу електронних спінів, локалізованих на дефектах структури, на механічні властивості кристалів до недавнього часу не приймали до уваги. Це обумовлено тим, що процеси в системі спінів

дефектів довгий час а priori розглядались як рівноважні, а тому вважалось, що вони спричиняють занадто малий внесок в пластичність у порівнянні з пружними та електростатичними взаємодіями в підсистемі структурних дефектів.

Одержання експериментальних доказів впливу спін-залежних процесів на пластичну деформацію іонних та ковалентних кристалів в МП і зростання в останні роки кількості публікацій на цю тему визначили виникнення нового напрямку в фізиці пластичності: спінової мікромеханіки, метою якої є одержання знань про мікроскопічні спін-залежні процеси, які впливають на механічні властивості твердих тіл.

В наших попередніх дослідженнях [3-5] було показано, що дія слабого постійного магнітного поля на кристали кремнію викликає помітні зміни мікротвердості і, тим самим, стимулює появу вказаних кристалах магнітомеханічного ефекту (ММЕ).

З нашої точки зору представляє інтерес дослідження комбінованої дії радіаційного опромінення і магнітного поля на механічні властивості напівпровідникових кристалів кремнію. Зовнішні впливи на тверде тіло потоку електромагнітних квантів оптичного, рентгенівського і γ -діапазонів, а також легких частинок (наприклад, β^-), як зазначає автор оглядової роботи [1] в значній мірі схожі, оскільки початково вказані впливи приводять до електронних збуджень, а потім в результаті розпаду цих збуджень – до іонізації, фотохімічних реакцій та до зміщення атомів з вузлів решітки. Ця схожість робить зазначені впливи зручним інструментом дослідження природи ММЕ і різноманітних комбінованих ефектів, які можуть бути нелінійними, неадитивними і внаслідок цього важко прогнозованими.

Разом з тим одночасна дія слабого МП і фонового опромінення є звичайними умовами оточуючого середовища, що робить окреслену проблему ще й життєво важливою.

Особливий інтерес викликають результати впливу радіаційного опромінення, а також комбінованої дії МП і радіаційного опромінення на напівпровідникові матеріали. Зокрема, в роботі [6] досліджені радіаційно-індуковані та пострадіаційні зміни мікротвердості монокристалів кремнію, які виникають в результаті опромінення слабоінтенсивним ($I = 9 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$) потоком β -частинок ($W = 0,20 \div 0,93 \text{ MeV}$). Виявлено характерний час опромінення $\tau_c = 75 \text{ min}$, при якому спостерігається інверсія знаку радіаційно-пластичного ефекту: опромінення протягом $\tau < \tau_c$ призводить до немонотонного оборотного зміцнення, а протягом $\tau > \tau_c$ – до немонотонного оборотного знеміцнення. Показана кореляція немонотонних залежностей мікротвердості та концентрації електрично активних дефектів.

В контексті досліджень, присвячених радіаційно-стимульованим та магніто-стимульованим змінам властивостей напівпровідників, слід

На рис. 1 представлена релаксаційна залежність відносної мікротвердості в опроміненних зразках Si, яка має немонотонний характер.

Як видно з одержаних результатів, РО використаних в роботі потужностей ефективно впливає на мікротвердість кремнію, яка зменшується в опроміненому кремнії на $16 \div 25\%$.

Явище зміни мікротвердості під впливом опромінення γ -квантами можна класифікувати як радіаційно-механічний ефект (РМЕ). Слід зазначити, що виявлений РМЕ не релаксує протягом тривалого часу (~ 45 діб).

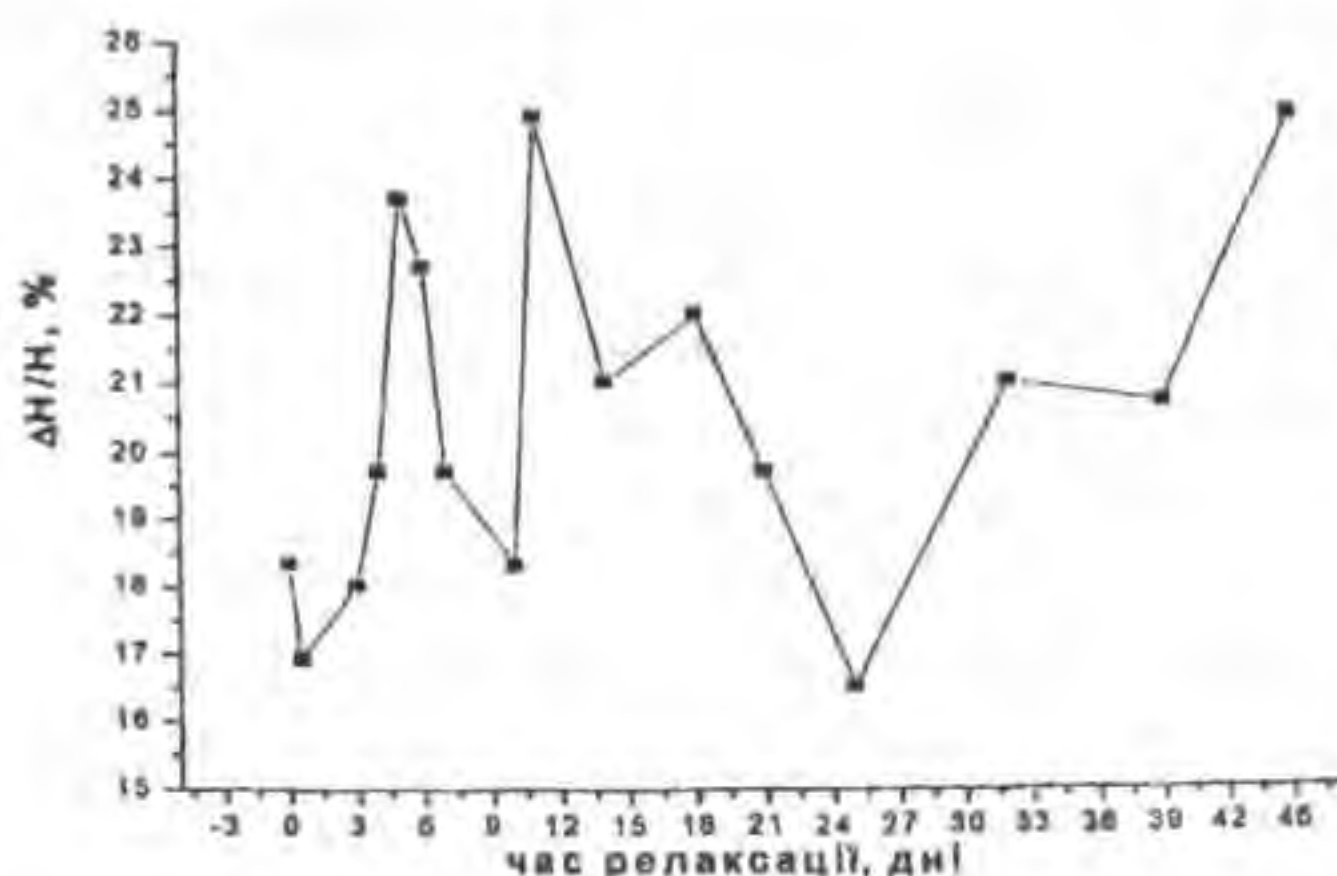
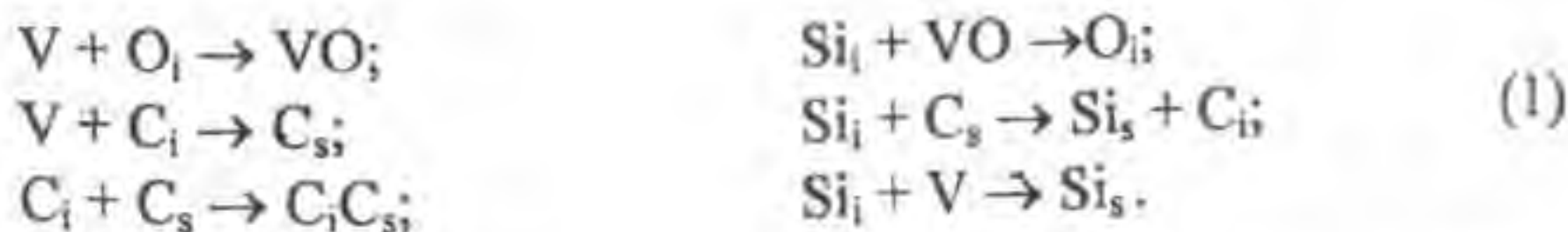


Рис.1. Релаксація відносної зміни мікротвердості зразків кремнію, що зазнали опромінення γ -квантами ^{207}Bi .

Представлені на рис. 1 результати свідчать на користь того, що в результаті опромінення кристалів кремнію γ -квантами, в цих кристалах ініціюються довготривалі процеси в підсистемі структурних дефектів, які позначаються на величині H . Найбільш імовірною причиною немонотонного характеру пострадіаційних змін мікротвердості є зміна з плином часу концентрацій різних комплексів радіаційних дефектів (РД), введених опроміненням.

Взагалі, зміна концентрації дефектів при радіаційно-стимульованому впливі може бути результатом широкого спектра реакцій, серед продуктів яких можуть виявитись як комплекси акцепторного типу, так і комплекси електрично неактивні:



В міждефектних реакціях, які представлені у виразі (1) індекс "i" відноситься до міжвузлових атомів кисню (O), вуглецю (C), кремнію (Si), індекс "s" – до відповідних атомів у вузлах кристалічної решітки.

Як слідує з роботи [9], міжвузлові атоми кремнію можуть витіснити вуглець (який знаходиться в вузлах кристалічної решітки) в міжвузлове положення по реакції Уоткінса $\text{Si}_i + \text{C}_s \rightarrow \text{Si}_s + \text{C}_i$.

В свою чергу, атоми вуглецю, що перейшли в міжвузловий стан, можуть встановлювати зв'язок з атомами вуглецю, який знаходиться в вузлах кристалічної решітки і утворювати комплекси $\text{C}_i - \text{C}_s$ [9].

Немонотонний характер залежності РМЕ від часу релаксації обумовлений, на наш погляд, конкуруючим характером протікаючих міждефектних реакцій, які приведені у виразі (1), і нерівномірною зміною концентрації структурних і домішкових комплексів. До нерівноважної зміни концентрацій вказаних комплексів, імовірно, призводить висока рухливість при кімнатній температурі вакансій і міжвузлових атомів, утворених в результаті дії γ - опромінення. Енергія міграції ізольованих вакансій, як відомо, складає для р-Si величину $\sim 0,30$ еВ. Міжвузловим атомам відповідає енергія міграції 0,15 еВ (в рівноважних умовах).

Таким чином, в нашій роботі досліджена кінетика індукованих γ -опроміненням змін мікротвердості Cz – Si. В основі виявлених змін N лежить багатостадійний характер перетворення підсистеми структурних (власних і радіаційних) дефектів. Як уже відмічалось, РМЕ є стабільним і не релаксує з часом. Причиною цього, ймовірно, є те, що радіаційні дефекти (РД), які призводять до появи РМЕ, не відпалюються при кімнатній температурі, тобто РД при кімнатній температурі є стабільними.

Цікавим з нашої точки зору є питання про те, як ці немонотонні зміни концентрації N міжвузлового кисню, киснево-вакансійних комплексів, комплексів, які складаються з міжвузлового вуглецю і вуглецю у вузлі, та інших комплексів, виникнення яких обумовлене радіаційною обробкою, позначаються на величині та характері магнітомеханічного ефекту. При дослідженні цього питання були встановлені наступні експериментальні факти.

Якщо звичайно величина зміни мікротвердості (тобто величина ММЕ) складає $\sim 25\%$ (рис. 2а), то після подвійної обробки (МО + РО) мікротвердість змінювалась на $\sim 32\%$, тобто ММЕ досягав величини $\sim 32\%$ (рис. 2б). Як видно з рис. 2(б, в), специфіка впливу РО на мікротвердість залежить від того, в який момент здійснювалась РО, а саме, здійснювалась РО до МО чи після МО. РО, яка проводилась після МО, приводила до посилення ММЕ. Слід зазначити, що це явище посилення ММЕ було нетривалим (~ 4 години), після чого ММЕ релаксував і набував значень, які (з урахуванням похибки експерименту) були майже співмірні з РМЕ (див. рис. 2б). Різке зменшення (на $\sim 7\%$) ММЕ після подвійної обробки (МО + РО) може бути пов'язане з протіканням твердотільних реакцій між дефектами, утвореними в результаті зазначеної подвійної обробки. Слід нагадати, що основні реакції, що протікають внаслідок РО,

приведені у виразі (1). В той же час, як показано в [10], основними реакціями, які протікають внаслідок МО є розпад під впливом магнітної дії комплексів SiO_x – преципітатів і квазімолекул Si-O-Si – та послідовне утворення комплексів O-V , точніше А-подібних дефектів.

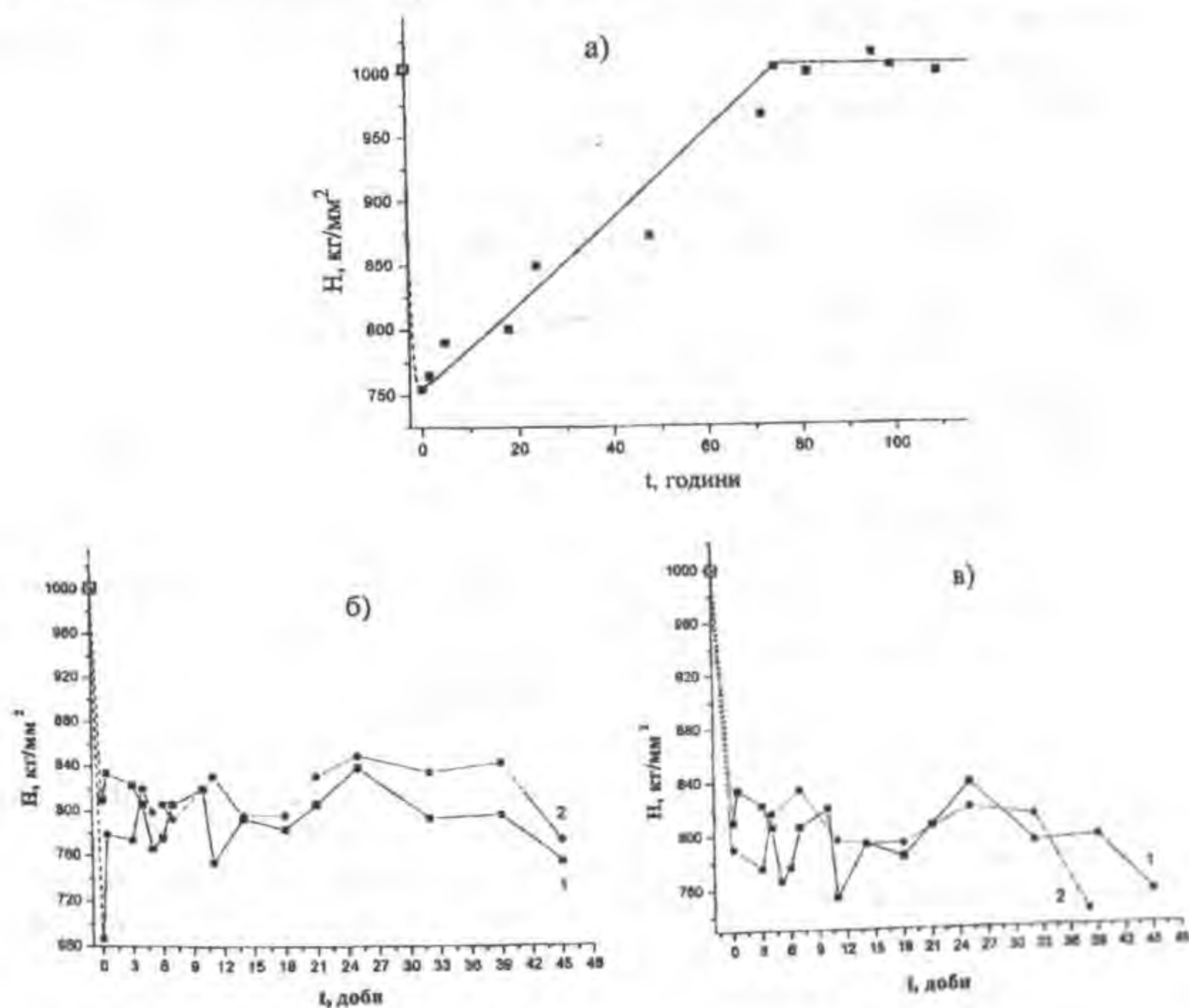


Рис.2. Релаксація мікротвердості зразків кремнію:

- - мікротвердість еталонних (вихідних) зразків кремнію;
- а) зразки Si, після обробки в магнітному полі;
- б) зразки Si після γ - опромінення (залежність 1) та після подвійної обробки (МО + РО) (залежність 2);
- в) зразки Si після γ - опромінення (залежність 1) та після подвійної обробки (РО + МО) (залежність 2).

Не виключено, що додаткова концентрація вакансій та міжвузлового кисню, яка виникає в кристалі Si при РО, приводить до того, що ці радіаційні дефекти починають брати участь в комплексоутворенні. При взаємодії радіаційних дефектів з комплексами, утвореними при МО, імовірно, виникають багатовакансійні комплекси з киснем, зокрема,

комплекси кисень-бівакансія ($O-V_2$). Тобто, може бути ситуація, коли до А-подібного центру добавляється ще одна вакансія. Аналогічно відбувається формування комплексів, наприклад, з трьох вакансій з одним або трьома атомами кисню [9].

Зменшення концентрації вакансій в приповерхневих шарах внаслідок протікання реакцій комплексоутворення приводить до зниження мікротвердості і до посилення ММЕ після подвійної обробки ($MO + PO$). Вакансії та їх рух по кристалу створюють зони стиснення в кристалі, саме тому зникнення подібних зон стиснення в приповерхневих шарах і призводить до зменшення Н та до посилення ММЕ. Проте, слід зазначити, що протікання твердотільних міждефектних реакцій, викликане подвійною обробкою ($MO + PO$), призводить до утворення комплексів, які є метастабільними. Про це свідчить той факт, що ефект посилення ММЕ (з 25 % до 32 %) триває протягом ~ 4 годин, після чого, ймовірно, метастабільні комплекси розпадаються і ефект зміни ММЕ, спричинений подвійною обробкою ($MO + PO$), релаксує до значень РМЕ, тобто релаксує, практично, до величини ефекту, спричиненого самою лише РО.

Розглянемо тепер ефект спричинений ще однією подвійною обробкою, яка полягала в тому, що спочатку кристали Si піддавались дії РО, а потім дії МО. Така обробка ($PO + MO$), як видно з рис. 2в, практично, не впливала на зміни мікротвердості, викликані МО, а отже, на ММЕ.

Схематично процеси, які відбуваються в кристалі при РО і подальшій експозиції в МП, можуть бути пояснені виходячи з наступних міркувань. Можна припустити, що в наших експериментах РО викликала пониження чутливості механічних властивостей кристала до МП. Отже, дії РО могли бути піддані в основному ті точкові дефекти, які є магніточутливими. РО призводить до такої модифікації магніточутливих центрів та їх комплексів, які під впливом РО трансформуються в нечутливі до МП центри. В результаті наступна після РО дія не призводить до зміни величини та характеру релаксації ММЕ.

На користь приведених міркувань свідчить те, що зміни мікротвердості, викликані РО в підсистемі точкових дефектів, аналогічні тим, які можуть бути стимульовані в кристалах подвійною обробкою ($PO + MO$). Таким чином, в нашій роботі виявлено, що здійснене перед МО кристалів кремнію (які як правило, містять магніточутливі комплекси точкових дефектів) γ - опромінення, гасить чутливість комплексів дефектів до магнітного впливу. Отже, показано, що РО може бути використане в якості інструмента для дослідження магніточутливих центрів та їх комплексів, а саме такого інструмента, який дозволяє селективно регулювати їх магніточутливий стан.

Робота виконана в рамках спільного проекту фундаментальних досліджень Державного фонду фундаментальних досліджень України і Білоруського республіканського фонду фундаментальних досліджень "ДФФД - БРФФД - 2005" (проект № 10.01/008).

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Головин Ю. И. Магнитопластичность твердых тел. // ФТТ. – 2004. – Т.46, №5. – С.769-803.
2. Моргунов Р. Б. Спиновая микромеханика в физике пластичности. // УФН. – 2004. – Т.174, №2. – С.131-153.
3. Макара В. А., Кольченко Ю. Л., Стебленко Л. П., Руденко О. В., Науменко С. М. Вплив постійного магнітного поля на мікротвердість кристалів кремнію. // Вісник Київського університету, Серія: Фіз.-мат. науки. – 2003. – Вип. № 1. – С.377-383.
4. Макара В.А., Стебленко Л.П., Кольченко Ю.Л., Науменко С.М., Патран О.А. Дослідження впливу магнітного поля на кристали методом тривалої твердості. // Металлофизика и новейшие технологии, 2005, т.27, №4, с.527-534.
5. Makara V.A., Steblenko L.P., Kolchenko Yu.L., Naumenko S.M., Patran O.A., Kravchenko V.M., Dranenko O.S. Magnetic-field-induced modification of properties of silicon lattice defects. // Solid State Phenomena. – 2005. – Vol.108-109. – P.339-344.
6. Головин Ю.И., Дмитриевский А.А., Сучкова Н.Ю., Бадылевич М.В. Многостадийное радиационно-стимулированное изменение микротвердости монокристаллов Si, инициируемое малоинтенсивным β -облучением. // ФТТ. – 2005. – Т.47, №7. – С.1237-1240.
7. Климов Ю.А., Масловский В.М., Тарасенко В.В. Воздействие импульсного магнитного поля на электрофизические параметры МДП-структур. // Электронная техника. – 1990. – Т.3, №5(139). – С.20-25.
8. Климов Ю.А., Масловский В.М., Холоднов К.В. Долговременная релаксация параметров полупроводниковых структур после воздействия магнитного поля. // Электронная техника. – 1991. – Т.3, №5(144). – С.22-26.
9. Вавилов В. С., Киселев В. Ф., Мукашев Б. Н. // Дефекты в кремнии и на его поверхности. – М.: Наука, 1990. – 216с.
10. Левин М. Н., Зон Б. А. Воздействие импульсных магнитных полей на кристаллы Cz-Si. // ЖЭТФ. – 1997. – Т.111, №4. – С.1373-1397.

Поступила в редакцію 28.12.05

УДК 519.9

Борис А. Охріменко¹, Катерина С.
Яблочкова²

Оцінка коливального моменту імпульсу молекули H_2O_2

Розв'язано обернену спектральну задачу з використанням частот нормальних коливань обраної молекули, а також частот нормальних коливань у відповідних агрегатних станах її ізотопної модифікації. Задача розв'язана без попередніх припущень про характер силового поля.

Отримані результати підтвердили існування коливального моменту імпульсу, що виникає при одночасному збудженні двох нормальних коливань молекули H_2O_2 із близькими частотами ($\nu_1=3802\text{ см}^{-1}$, $\nu_4=3803\text{ см}^{-1}$). Виявлено певну різницю Фур'є спектрів функцій, що описують рух атому водню при одночасному збудженні коливань ν_1 і ν_4 та накладанням на них обертового руху для різних конфігурацій молекули H_2O_2 .

Ключові слова: обернена спектральна задача, молекула H_2O_2

¹ E-mail: bao@mail.univ.kiev.ua

² E-mail: yablochkova@yahoo.com

Boris A. Okhrimenko¹, Kateryna S.
Yablochkova²

Estimation of the vibration angular momentum of the H_2O_2 molecule

A reverse spectral problem was solved by means of using H_2O_2 molecule normal vibrations in both gas and condensed state, as well as normal vibrations of its isotope modification in appropriate states. The problem was solved without preliminary assumptions about the nature of the force field.

Obtained results have confirmed the existence of the vibration angular momentum that appears when two vibrations of H_2O_2 molecule with close frequencies ($\nu_1=3802\text{ cm}^{-1}$, $\nu_4=3803\text{ cm}^{-1}$) are excited simultaneously. A certain difference in the Fourier spectra of the hydrogen atom movement functions in case of the simultaneous excitation of ν_1 and ν_4 vibrations in the presence of the rotational movement was found for different configurations of H_2O_2 molecule.

Key words: Reverse spectral problem, H_2O_2 molecule

Одним із проявів асиметричності у природі є феномен молекулярної хіральності, що полягає у існуванні пар молекул, які розрізняються конфігураційно і за своєю структурою є дзеркальним відображенням одна одної.

На сьогоднішній день спостерігається науковий інтерес до наступних двох проблем хіральності біоорганічних молекул. Одна з них - феномен порушення дзеркальної симетрії, який полягає у тому, що у живій природі зустрічається лише один тип енантіомерів, не дивлячись на енергетичну їх еквівалентність. Інша проблема полягає у пошуку методів управління хіральною станами молекул. В останній час активно

обговорюється можливість застосування для цього лазерного випромінювання.

Очікується, що розвиток оптичних методів управління хіральністю може мати велике значення не тільки для вивчення фундаментальних властивостей хіральних молекул, але й для практичних застосувань у хімії та медицині. Досліджувана молекула H_2O_2 симетрії C_2 належить до сполук, що характеризуються хіральністю.

Авторами зроблено припущення, що при одночасному збудженні декількох коливань молекули H_2O_2 може спостерігатися ненульовий коливальний момент імпульсу, і що у подальшому це явище можна використовувати для управління хіральністю цієї молекули.

Дана робота ставить на меті перевірити припущення про існування ненульового коливального моменту імпульсу при одночасному збудженні близьких за частотою нормальних коливань молекули H_2O_2 .

З метою перевірки цієї гіпотези було проведено відповідні розрахунки для "правої" (так званої D -конфігурації) та "лівої" (L -конфігурації) молекул H_2O_2 у конденсованому та газоподібному станах. Для цього була розв'язана обернена спектральна задача з використанням експериментальних частот нормальних коливань досліджуваної молекули, а також частот нормальних коливань у відповідних агрегатних станах її ізотопної модифікації [1].

Було застосовано метод $3N$ - матриць, запропонований у роботі [2]. Відзначимо дві основні його особливості. По-перше, на відміну від багатьох поширених методів у ньому не використовуються попередні припущення про характер силового поля молекули. По-друге, цей метод можна застосовувати як для вільних молекул, так і для молекул у конденсованій фазі. Врахування впливу оточення на досліджувану молекулу забезпечується введенням у розрахунок частот трансляційних та лібраційних (ротаційних) коливань молекули. У зв'язку з цим в обчисленнях використовувалися $3N$ узагальнених координат, де N - число атомів молекули. У якості узагальнених координат було обрано декартові координати зміщень атомів із положень рівноваги.

Для визначення силової матриці молекули використовується формула:

$$\hat{V} = \hat{M} \hat{L} \hat{\omega} \hat{L}^T \hat{M}, \quad (1)$$

де $\hat{M}$ - діагональна матриця мас атомів, що входять до складу молекули; матриця $\hat{L}$ визначає форму власних та невласних нормальних коливань молекули; $\hat{\omega}$ - діагональна матриця квадратів частот, як власних, так і невласних нормальних коливань молекули; знаком тильда позначена операція транспонування.

У якості матриці $\hat{M}$ була обрана матриця наступного вигляду:

$$\hat{M} = \text{diag}\{m\text{O}, m\text{O}, m\text{O}, m\text{O}, m\text{O}, m\text{O}, m\text{H}, m\text{H}, m\text{H}, m\text{H}, m\text{H}, m\text{H}\}. \quad (2)$$

Тут mO - маса атома кисню $mO=15.995$ а.о.м., mH - маса атому водню, $mH=1.078$ а.о.м.

Матриця квадратів частот нормальних коливань молекули H_2O_2 має вигляд:

$$\bar{\omega}^2 = \text{diag}\{\omega_1^2, \omega_2^2, \omega_3^2, \omega_4^2, \omega_5^2, \omega_6^2, \omega_{tx}^2, \omega_{ty}^2, \omega_{tz}^2, \omega_{rx}^2, \omega_{ry}^2, \omega_{rz}^2\}. \quad (3)$$

В останньому виразі ω_i - частоти власних коливань, ω_{ti} - невласні трансляційні частоти, а ω_{ri} - невласні обертальні частоти коливань навколо осей x, y, z .

Вектор зміщення атомів із положення рівноваги в декартових координатах $\bar{x}$ та вектор нормальних координат $\bar{q}$ зв'язані наступним співвідношенням:

$$\bar{x} = \hat{L}\bar{q}. \quad (4)$$

Для розв'язання оберненої спектральної задачі для молекули H_2O_2 з умов ортонормування була визначена матриця $\hat{L}_0$, що визначає форму нормальних коливань молекули. У випадку молекули H_2O_2 дана матриця має наступний вигляд:

$$\hat{L}_0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & a2 & az & alx & aly & g & 0 & 0 & 0 & c & a \\ 0 & 0 & -b2 & bz & blx & bly & 0 & g & 0 & -e & 0 & b \\ a3 & 0 & 0 & 0 & clx & cly & 0 & 0 & g & -f & -d & 0 \\ 0 & 0 & -a2 & -az & alx & aly & g & 0 & 0 & 0 & c & -a \\ 0 & 0 & b2 & -bz & blx & bly & 0 & g & 0 & -e & 0 & -b \\ a3 & 0 & 0 & 0 & -clx & -cly & 0 & 0 & g & f & d & 0 \\ 0 & -c2 & 0 & -alz & d1x & d1y & g & 0 & 0 & 0 & -c1 & a1 \\ 0 & -d2 & 0 & blz & elx & ely & 0 & g & 0 & e1 & 0 & -b1 \\ -b3 & 0 & 0 & 0 & flx & fly & 0 & 0 & g & -f1 & d1 & 0 \\ 0 & c2 & 0 & alz & d1x & d1y & g & 0 & 0 & 0 & -c1 & -a1 \\ 0 & d2 & 0 & -blz & elx & ely & 0 & g & 0 & e1 & 0 & b1 \\ -b3 & 0 & 0 & 0 & -flx & -fly & 0 & 0 & g & f1 & -d1 & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

де $a1 = \frac{a \cdot lh \cdot \cos(\varphi - es)}{l \cdot \cos(\varphi - es)}$; $b = a \cdot \tan(es)$; $c = \frac{1}{\sqrt{AC + BC}}$;

$b1 = a1 \cdot \tan(\varphi - es)$; $AC = \frac{2mO \cdot (1 + l^2 \sin^2(es))}{4aO^2}$;

$BC = \frac{2mH \cdot (aH^2 + \frac{1}{4}lh^2 \sin^2(\varphi - es))}{aO^2}$; $c1 = \frac{c \cdot mO}{mH}$; $d = \frac{c \cdot l \cdot \sin(es)}{2aO}$;

$d1 = \frac{c \cdot lh \cdot \sin(\varphi - es)}{2 \cdot aO}$; $AE = 2mO \left(1 + \frac{l^2 \cos^2(es)}{4aO^2} \right)$; $e = \frac{1}{\sqrt{AE + BE}}$;

$$\begin{aligned}
 BE &= 2mH \cdot \frac{aH^2 + 1/4 \cdot lh^2 \cdot \cos^2(\varphi - es)}{aO^2}; & el &= \frac{e \cdot aH}{aO}; & f &= \frac{e \cdot l \cdot \cos(es)}{2 \cdot aO}; \\
 f1 &= \frac{e \cdot lh \cdot \cos(\varphi - es)}{2 \cdot aO}; & g &= \frac{1}{\sqrt{2(mO + mH)}}; & b3 &= \frac{a3 \cdot mO}{mH}; \\
 a3 &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot mO \cdot (1 + mO/mH)}}; & a2 &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot mO \cdot (2 + a^2/b^2)}}; & b2 &= \frac{a2 \cdot a}{b}; \\
 c2 &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot mH \cdot (1 + a1^2/b1^2)}}; & d2 &= \frac{c2 \cdot a1}{b1}; & AD &= \left(\frac{a + b \cdot a2/b2}{a1 + b1 \cdot c2/d2} \right)^2; \\
 BD &= 2 \cdot mO^2 \cdot \frac{1 + (c2/d2)^2}{mH}; & az &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot mO \cdot \left(1 + (a2/b2)^2 \right) + BD \cdot AD}}; \\
 a1z &= az \cdot mO \cdot \frac{a + b \cdot a2/b2}{mH(a1 + b1 \cdot c1/d1)}; & b1z &= \frac{a1z \cdot c2}{d2}; & bz &= \frac{az \cdot a2}{b2}; & Fb &= \frac{f1 - f}{e + el}; \\
 Fa &= \frac{d + d1}{c \cdot (1 + mO/mH)}; & Ff &= \frac{mO}{mH}; & Fd &= Ff \cdot Fa; & Fe &= Ff \cdot Fb; & b1x &= c1x \cdot Fb; \\
 a1x &= c1x \cdot Fa; & d1x &= c1x \cdot Fd; & elx &= c1x \cdot Fe; & f1x &= c1x \cdot Ff; \\
 c1x &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot mO \cdot (Fa^2 + Fb^2 + 1) + 2 \cdot mH \cdot (Fd^2 + Fe^2 + Ff^2)}}; \\
 Fb' &= \frac{f + f1 \cdot a3/b3}{e + el}; & Fa' &= \frac{d - d1 \cdot a3/b3}{c + c1}; & Ff' &= \frac{mO \cdot a3}{mH \cdot b3}; & Fd' &= Ff' \cdot Fa' \cdot \frac{b3}{a3}; \\
 Fe' &= Ff' \cdot Fb' \cdot \frac{b3}{a3}; & b1y &= c1y \cdot Fb'; & a1y &= c1y \cdot Fa'; & d1y &= c1y \cdot Fd'; \\
 ely &= c1y \cdot Fe'; & c1y &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot mO \cdot (Fa'^2 + Fb'^2 + 1) + 2 \cdot mH \cdot (Fd'^2 + Fe'^2 + Ff'^2)}}; \\
 f1y &= c1y \cdot Ff'.
 \end{aligned}$$

Перші чотири стовпчики матриці є симетричними відносно операції симетрії C_2 групи C_2 , отож відповідають представленню А. П'ятий і шостий стовпчики є антисиметричними, тобто відповідають представленню В, причому $L5$ характеризує валентне коливання, а $L6$ - деформаційне, "віялового" типу, яке, в основному, стосується О-Н зв'язку. $L1$ характеризує вертикальні, а $L2$ - горизонтальні зміщення, із яких можна сконструювати валентне й деформаційне коливання, у яких також беруть

участь О-Н зв'язки. L_3, L_4 - нагадують валентне й деформаційне коливання для О-О зв'язку.

Для врахування ангармонізму коливань, що проявляється у зміщенні коливних рівнів у бік зменшення їх енергії, використано формулу для знаходження нульових коливань

$$\omega_{0i} = \omega_i(1 + u_i\omega_i), \quad (6)$$

де ω_i і ω_{0i} - частота, що спостерігається експериментально, та частота нульових коливань, відповідно [3]. В обчисленнях припускається, що параметр ангармонізму у випадку молекули перекису водню є близьким за величиною до значення параметра ангармонізму молекули води, а саме $u = 1.5 \cdot 10^{-5}$ [4].

Матриця $\hat{L}$ визначається неоднозначно, якщо якому-небудь з незвідних представлень групи симетрії молекули, відповідає більше ніж одне власне нормальне коливання. У випадку молекули H_2O_2 коливання $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4$ відповідають представленню А, а ν_5, ν_6 - представленню В.

Проблема неоднозначності задачі розв'язується наступним чином: нехай L_{01} і L_{02} - ортогональні вектори, що відповідають незвідному представленню Γ_a , у нашому випадку - стовпці матриці $\hat{L}_0$. Тоді вектори L_1 і L_2 , що отримані зі співвідношення

$$\begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\psi & \sin\psi \\ -\sin\psi & \cos\psi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{01} \\ L_{02} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

теж є розв'язками рівняння. Параметр ψ , що входить у рівняння (7) носить назву параметру форми коливань. Значення параметра ψ є невідомим, тому для $\hat{V}$ отримаємо множину розв'язків.

Таблиця 1. Параметри форм коливань молекули H_2O_2 у газоподібному і та рідкому станах (рад).

№ параметра	Номери стовпців	ψ , газ	ψ , рідина
1	1 - 2	1.03	-0.04
2	1 - 3	2.471	-0.04
3	1 - 4	1.57	-0.07
4	2 - 3	-0.044	1.57
5	2 - 4	0.054	-0.01
6	3 - 4	0.67	0.69
7	5 - 6	1.126	2.70

В загальному випадку число параметрів форми дорівнює

$$\Psi = \frac{1}{2} \sum_a n_a(n_a - 1), \quad (8)$$

де n_a - число нормальних коливань, що припадають на незвідне представлення Γ_a групи симетрії G . У випадку молекули H_2O_2 необхідна кількість параметрів форми становить 7.

Параметри форми нормальних коливань введені у матрицю $\hat{L}$ відповідно до співвідношення (7). Параметр форми 1, наприклад, вводиться у перший і другий стовпці матриці, що відповідає "змішуванню" форм коливань ν_1 та ν_2 , отриманих з матриці $\hat{L}_0$. Як видно з таблиці 1, стовпці 1 - 4 містять більше ніж один параметр форми. Тому знаходилися вони поступово, один за одним, фіксуючи значення кожного з параметрів у послідовності, вказаній у таблиці 1. Така послідовність операцій повторювалася, поки не було досягнуто оптимального значення параметрів.

Для того щоб визначити оптимальні значення параметрів форми, були виконані наступні обчислення. Визначено власні значення матриці $\hat{D}$

$$\hat{D} = \hat{M}\hat{V}, \quad (9)$$

де матриця $\hat{M}$ відповідає молекулі D_2O_2 , $\hat{V}$ - силова матриця молекули H_2O_2 .

Власні значення матриці $\hat{D}$ дорівнюють квадратам нульових частот ω_{0i}^I нормальних коливань молекули D_2O_2 у відповідному агрегатному стані.

Для кількісної характеристики ступеня узгодженості між обчисленими частотами ω_{0i}^I та значеннями ω_{0i} використовувалася величина, що являє собою квадрат вектора, що дорівнює різниці векторів, складених із квадратів частот коливань. Один з векторів побудований із квадратів частот нульових коливань, у той час як другий - розрахований для ізотопної модифікації молекули у результаті розв'язку прямої спектральної задачі без підбору параметрів форм коливань.

$$\vec{\delta} = (\omega_{0i}^I)^2 - \omega_{0i}^2, \quad (10)$$

За мінімальним значенням $|\vec{\delta}|^2$ визначалися шукані значення параметрів форм коливань.

Відповідно до знайденої матриці $\hat{L}$ побудовано форми нормальних коливань молекули H_2O_2 , а також з'ясовано характер руху атомів у молекулі при одночасному збудженні у ній двох нормальних коливань з такими частотами: $\nu_1=3802 \text{ см}^{-1}$,



Рис 1. Полярна діаграма залежності потенціальної енергії L -конфігурації молекули H_2O_2 у газоподібному стані від напрямку зміщення кожного із атомів з положення рівноваги.

$$\nu_4 = 3803 \text{ см}^{-1}.$$

Для оцінки силового поля, в якому знаходиться атом водню молекули H_2O_2 , була побудована діаграма залежності потенціальної енергії молекули від напрямку постійного за величиною зсуву цього атома. Положення інших атомів молекули залишалися незмінними. Така процедура була виконана також для іншого атому водню та для обох атомів кисню. На рис. 1 представлена діаграма залежності потенціальної енергії від напрямку зміщення кожного із атомів із положення рівноваги для L -конфігурації молекули H_2O_2 у газоподібному стані. Діаграми потенціальної енергії іншої конфігурації молекули H_2O_2 та діаграми для рідкого стану не наводяться, оскільки є подібними до тої, що зображена на рис. 1.

Коливальний момент імпульсу був знайдений за відомою формулою

$$\bar{M} = \sum_i m_i \left[\vec{r}_i \times \frac{d\vec{r}_i}{dt} \right]. \quad (11)$$

Тут $\vec{r}_i$ - координата зміщення i -того атому молекули з положення рівноваги, m_i - i -того атому.

Також у роботі був оцінений Фур'є спектр функцій, що описують рух кожного з атомів молекули H_2O_2 при одночасному збудженні коливань ν_1 і ν_4 та накладанням на них обертового руху.

Розрахунки підтвердили існування ненульової проекції коливального моменту імпульсу, що виникає при одночасному збудженні двох нормальних коливань молекули H_2O_2 з близькими частотами $\nu_1 = 3802 \text{ см}^{-1}$, $\nu_4 = 3803 \text{ см}^{-1}$. Коливальний момент імпульсу виявився однакоим для обох енантіомерів і таким, що відрізняється за значенням для різних агрегатних станів H_2O_2 . Спостерігається гармонічне коливання значення ненульової проекції коливального моменту імпульсу M_z . Такий результат можна пояснити у наступний спосіб [5]: момент імпульсу замкнутої системи матеріальних точок зберігає з часом постійне значення у випадку, коли між

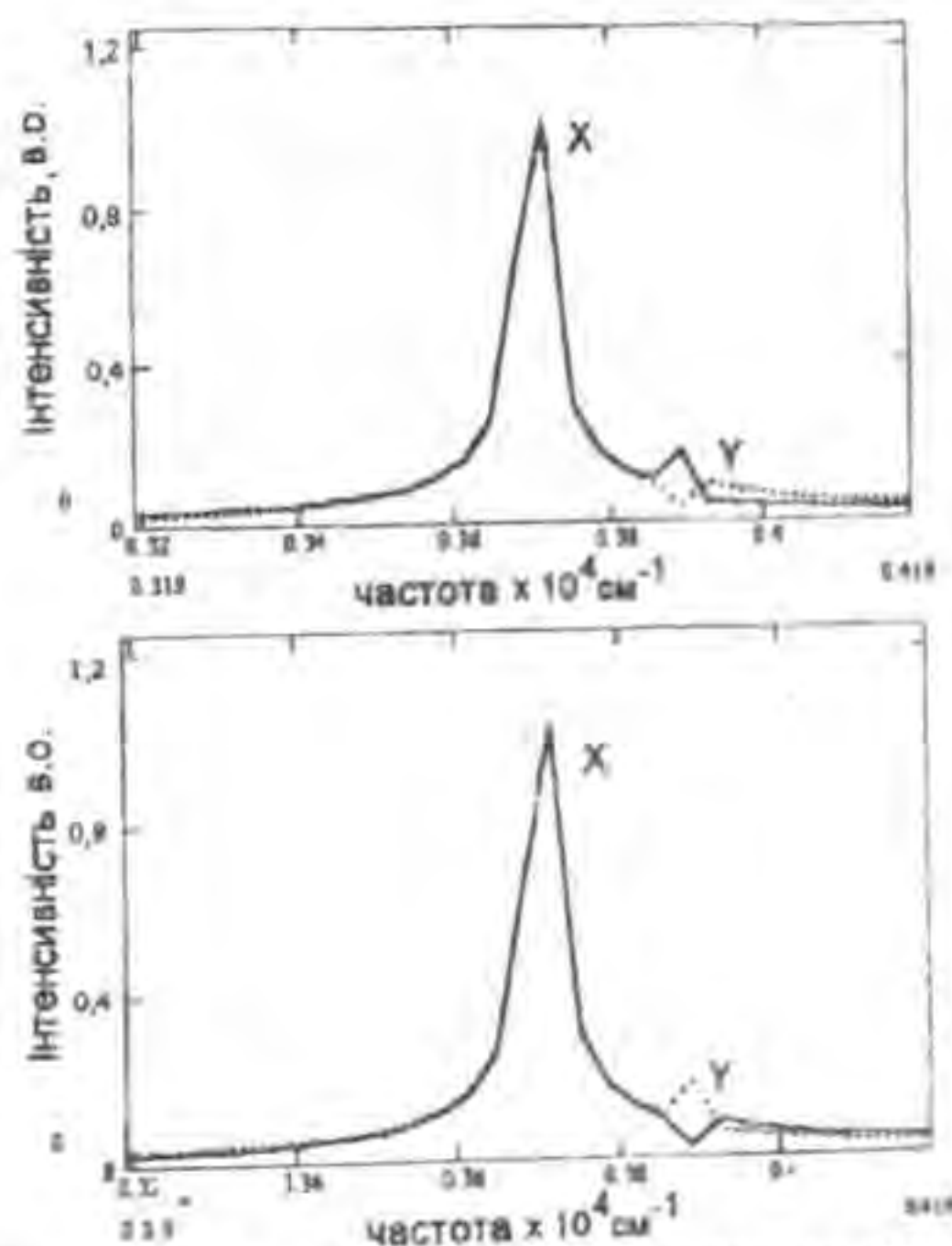


Рис 2. Спектр функцій, що описують рух атому водню у площинах X та Y для D -конфігурації (вгорі) та L -конфігурації (внизу) молекули H_2O_2 .

матеріальних точок зберігає з часом постійне значення у випадку, коли між

матеріальними точками системи діють лише центральні сили. Відомим є той факт [6], що між атомами багатоатомних молекул поряд із центральними діють нецентральні сили.

На рис. 2 зображено Фур'є спектри функцій, що описують рух атому водню при одночасному збудженні коливань $\nu_1 = 3802 \text{ см}^{-1}$, $\nu_4 = 3803 \text{ см}^{-1}$ та накладанням на них обертового руху з частотою $\nu_{rot} = 100 \text{ см}^{-1}$. Як видно із графіків, у спектрах руху атома водню проявляються комбінаційні коливально-обертові частоти і спостерігається деяка відмінність у спектрах руху цього атома у площинах X та Y для різних конфігурацій молекули H_2O_2 .

Автори висувають припущення, що описана особливість спектру, а також факт існування ненульової проекції коливального моменту імпульсу можуть бути використані для управління хіральністю молекули H_2O_2 .

Література

1. Накамото Кадзуо "ИК спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений" – Москва: Мир, 1991
2. Белый М.У., Охрименко Б.А., Яблочков С.М. Метод решения обратной спектральной задачи// Известия вузов МВ ССО СССР, физика, №4 – 1987. – с. 52-57
3. Свердлов Л.М. Ковнер М.А. Крайнов Е.П. "Колебательные спектры многоатомных молекул." – Москва: Наука, 1970
4. Білий М.У., Гайдідей Г.І., Охріменко Б.А. Девіація ОН- зв'язку в молекулі H_2O // Functional Materials. – 2000. – vol.7, №3. – с.543-545
5. Охріменко Б.А. Про можливість зміни з часом моменту імпульсу замкненої системи матеріальних точок //Укр фіз. Журн. 47, № 5 – 2002, – с. 500-507
6. Физическая Энциклопедия, гл ред. А.М. Прохоров – том 5 – Москва: "Советская энциклопедия", 1988

УДК 577.323.2

Ю.В. Пивоваренко,
О.М. Ляхов, В.Б. Шевченко

Залежність спектральних характеристик води від її електричного потенціалу

Досліджено вплив електричного потенціалу води на її спектральні характеристики. Показано, що УФ-спектр поглинання води залежить від її електричного потенціалу. Встановлено, що УФ-спектри поглинання водних розчинів поверхнево-активних речовин ідентичні спектрам поглинання води з позитивним потенціалом, а спектри розчинів поверхнево-інактивних речовин – спектрам води з негативним потенціалом. На прикладі хлориду натрію показано, що форма кристалів, які утворюються після випаровування розчинів залежить від електричного потенціалу води, що була використана для розчинення солі.

Ключові слова: вода та водні розчини, електричний потенціал, поверхнево-активні та поверхнево-інактивні речовини.

Yu.V. Pyvovarenko,
A.M. Lyakhov, V.B. Shevchenko

Dependence of spectral characteristics of water from electrical potential

The influence of electrical potential of water on its spectral characteristics is investigated. It is shown, that the UV-spectrum of absorption of water depends on its potential. It's determined, that the solution of surface-active substances is accompanied by occurrence in water of a positive charge, and surface-inactive – a negative charge. As is shown for sodium chloride, the form of crystals after solution vaporization depends on electrical potential of water, used for salt solution.

Keywords: water and water solutions, electrical potential, surface-active substances, surface activity.

Взаємодія води з речовиною та полем супроводжується зміною її електричного потенціалу [1-3]. Так, наприклад, при контакті зі склом, силікагелем, керамікою вода набуває позитивного потенціалу, а при контакті з активованим вугіллям, оксидом заліза (III) – негативного [1, 2]. Негативного заряду набуває вода після барботування воднем, а позитивного – киснем [1].

Позитивного потенціалу також набуває вода, яка контактує з металами, що розташовані в електрохімічному ряді напруг праворуч від водню (крім ртуті) [1, 4].

На величину електричного потенціалу впливають також погодні умови, зокрема, вологість повітря. Зволожене під час дощу повітря набуває негативного заряду [1], який накопичується в місцях конденсації вологи (наприклад, в лабораторному посуді), та може суттєво змінювати потенціал розчинів.

Розмаїття факторів, що впливають на воду, призводить до необхідності постійного контролю електричних потенціалів водних розчинів під час досліджень.

Метою роботи було вивчення впливу електричного потенціалу води на її спектральні характеристики та стан розчинених у воді речовин.

Позитивну електризацію води здійснювали за рахунок вибіркої адсорбції іонів гідроксилу з води силікагелем або при барботуванні води киснем. Негативну – за рахунок вибіркої адсорбції іонів водню з води активованим вугіллям або при барботуванні воднем. Барботування проводили під тиском 1,1 атмосфери з наступною дегазацією розчинів вакуумуванням при 13 мм рт. ст. протягом 20 хвилин [1, 2].

Для виміру різниці потенціалів між обробленою та необробленою водою використовували прилад Кьона для електрофорезу (U-подібну трубку з краном), одне з колін якого при зачиненому крані заповнювали зарядженою водою, а інше – незарядженою. Різницю потенціалів вимірювали за допомогою мілівольтметра DT-830B після відкриття крану.

Для спектральних вимірювань застосовували спектрофотометр Specord UV VIS.

В роботі досліджувалися УФ-спектри поглинання водних розчинів хлоридів та сульфатів лужних та лужно-земельних металів, натрієвих та калієвих солей жирних кислот, гліцерину, розчину аміаку, соляної та азотної кислот – «Укрреахим» (Україна).

Спектри поглинання води в УФ-діапазоні. Як виявилось, позитивна та негативна електризація води супроводжується збільшенням її оптичної щільності в діапазоні 185-220 нм (рис. 1, а). Залежно від знаку заряду положення максимуму та півширина смуги поглинання води в УФ-спектрах різняться. Для води з негативним зарядом довжина хвилі максимуму спектру складає 195 нм, а з позитивним – 205 нм, причому положення максимумів не залежить від способу електризації води.

УФ-спектри поглинання водних розчинів хлоридів натрію, калію, кальцію, аміаку, гліцерину, соляної та азотної кислот, а також інших досліджених поверхнево-інертивних речовин (ПІР) [5] в діапазоні 185-250 нм практично ідентичні та мають максимуми поблизу 195 нм (рис. 1, б, спектр 2), а спектри розчинів поверхнево-активних речовин (ПАР) – поблизу 205 нм (рис. 1, б, спектр 3).

Оскільки спектри розчинів ПАР та ПІР практично не залежать від хімічної природи розчинених речовин, а залежать лише від їх впливу на поверхневу активність, можна зробити висновок про те, що піки, які реєструються, зумовлені поглинанням саме води, а не розчинених в ній речовин. Порівняння наведених спектрів (рис 1, а, б) свідчить, що при контакті з ПАР вода набуває позитивного заряду, а з ПІР – негативного.

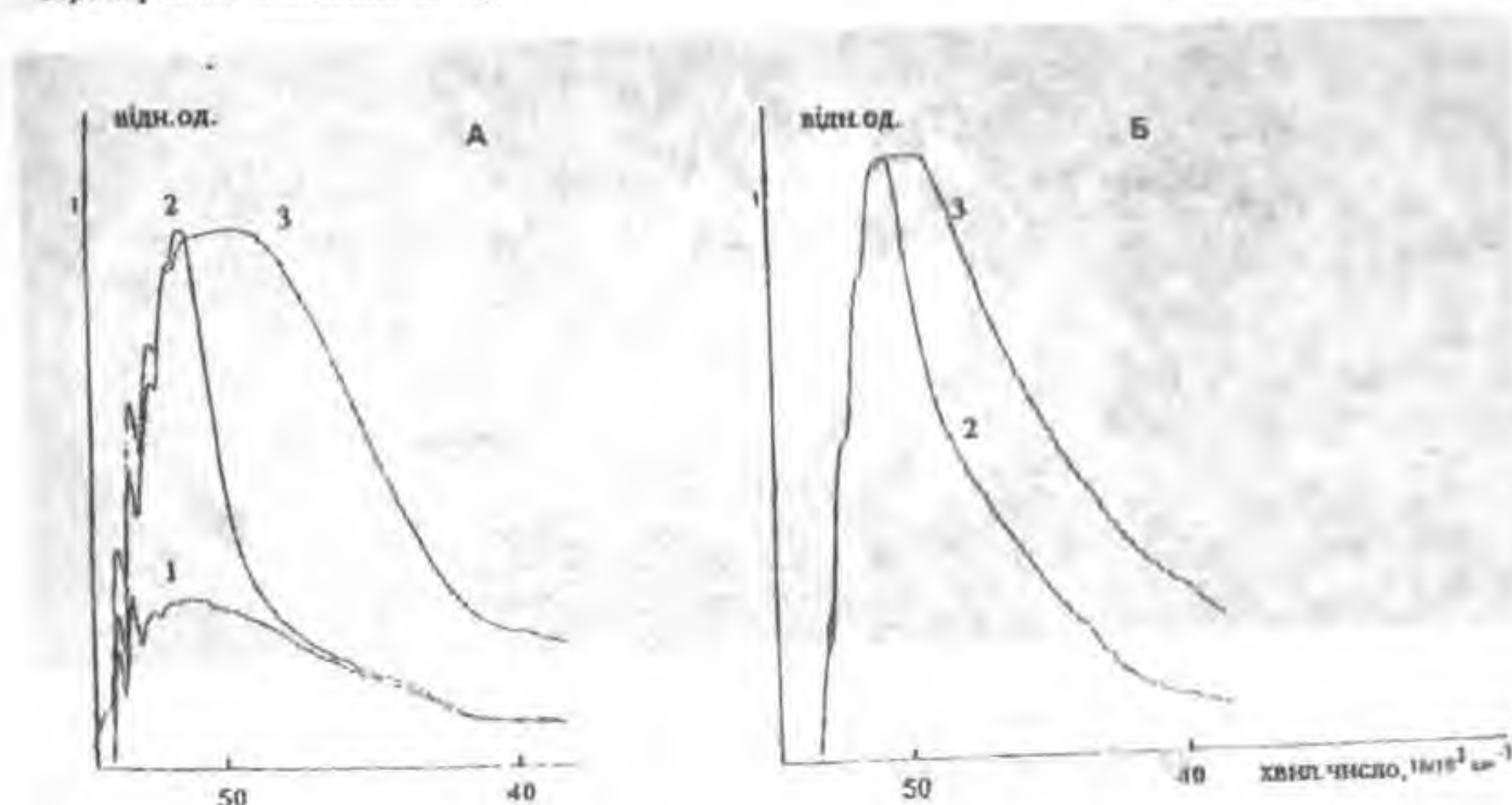


Рис. 1. УФ-спектри поглинання води (а): 1 – дистильована вода; 2 – вода з негативним потенціалом, що отримана після барботування воднем; 3 – вода з позитивним потенціалом, що отримана після барботування киснем; (б): 2 – водний розчин хлориду натрію (ПР); 3 – водний розчин стеарату натрію (ПАР).

Таким чином, на підставі УФ-спектрів поглинання водних розчинів можна визначити знак електричного заряду води та розчинених у воді речовин (протилежний по знаку заряду води).

Застосування спектральних способів визначення електричного потенціалу водних розчинів дозволило б виключити використання вимірювальних електродів, вплив яких може призводити до суттєвих змін електричних параметрів досліджуваної рідини та появи артефактів [2].

В роботі було виявлено також залежність форми кристалів NaCl , що утворюються після випаровування водних розчинів солі, від потенціалу води, що використовувалась для приготування розчинів. Після випаровування розчину хлориду натрію, для приготування якого використовувалась вода з позитивним потенціалом (або з додавання ПАР), утворюються кристали з чітко окресленими гранями (рис. 2, праворуч).

Після випаровування розчину солі, для приготування якого використовувалась вода з негативним потенціалом (або з додавання ПР), утворюється неструктурована плівка (рис. 2, ліворуч).

Ще більш помітно розрізняється форма кристалів хлориду натрію, що утворюються на поверхнях активованого вугілля та силікагелю. Якщо на поверхні активованого вугілля, яке сорбує з водних розчинів позитивні

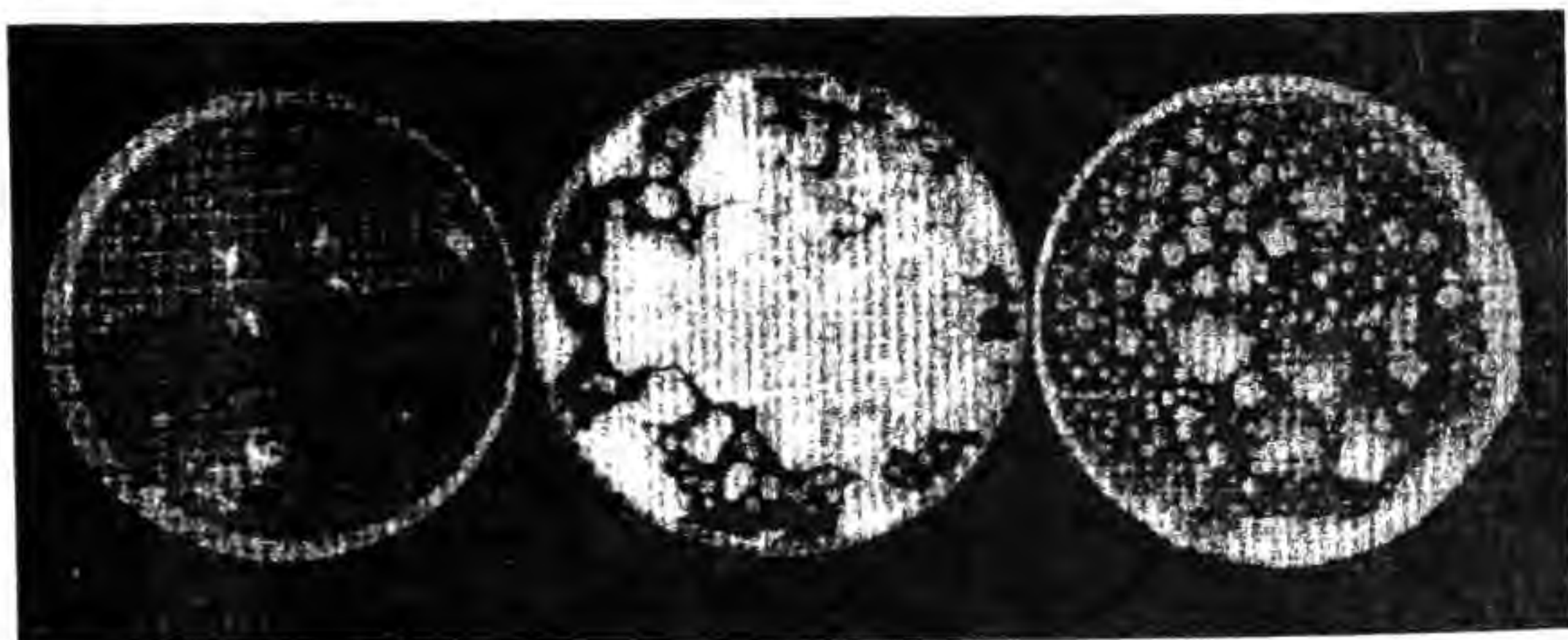


Рис. 2. Форма кристалів, що утворюються після випаровування водних розчинів хлориду натрію, для приготування яких використовувалась: вода з негативним потенціалом (або з додаванням ПР) – ліворуч; незаряджена дистильована вода – в центрі; вода з позитивним потенціалом (або з додаванням ПАР) – праворуч.

іони, утворюються звичні плоскі квадратні кристали, то на поверхні силікагелю, поверхня якого при контакті з водними розчинами заряджається негативно, утворюються нитчасті кристали (рис. 3).

Даний приклад демонструє вплив електричного потенціалу води на її властивості як розчинника.

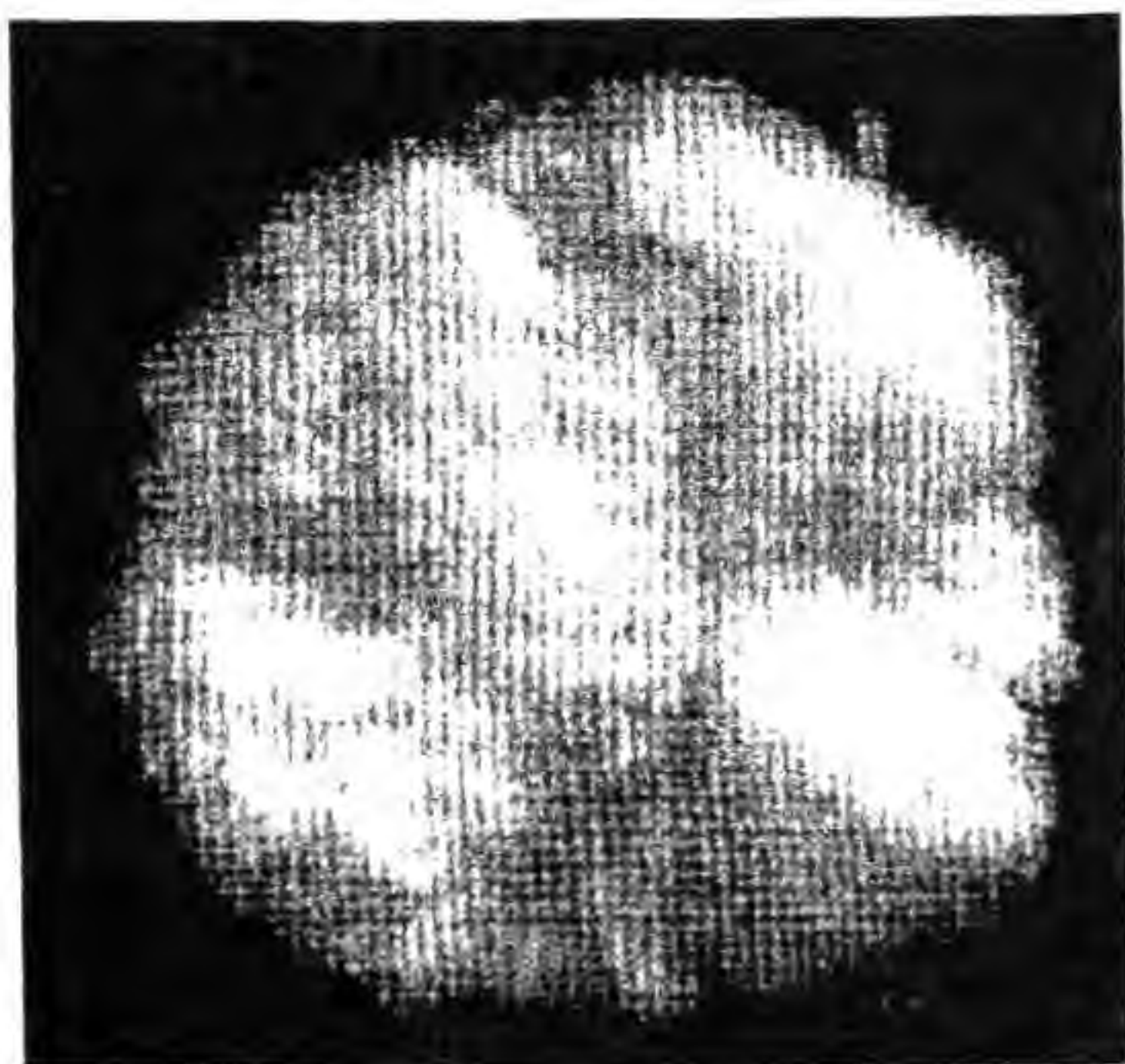


Рис. 3. На поверхні силікагелю, який сорбує негативні іони, утворюються нитчасті кристали.

Отже, спектральні характеристики водних розчинів можуть бути використані для контролю їх електричного потенціалу, що часто є необхідним на практиці.

Література

1. Некрасов Б.В. Основы общей химии. - Спб.: Лань, 2003, - 976 с.
2. Фридрихсберг Д.А. Курс коллоидной химии. - Спб.: Химия, 1995, - 400 с.
3. Пресман А.С. Электромагнитные поля и живая природа. - М.: Наука, 1968, - 268 с.
4. Гамеева О.С. Физическая и коллоидная химия. - М.: Высшая школа, 1977, - 328 с.
5. Воюцкий С.С. Курс коллоидной химии. - М.: Химия, 1978, - 512 с.

Надійшла до редакції 10.11.2005.

УДК 543.423:574

В.В. Пророк, с.н.с.,
Т.І. Макаренко., головний
спеціаліст,
Л.Ю. Мельниченко, с.н.с.

**Дослідження зв'язку між
надходженням ^{137}Cs до рослини
та складом ґрунтового розчину**

Скороспілі рослини різних видів вирощувалися одночасно (змішаний висів) у природних умовах на трьох дослідних ділянках у зоні відчуження Чорнобильської АЕС. Вимірювалися вміст ^{137}Cs , K, Ca, Mg та Na у цих рослинах та в відповідних ґрунтових розчинах. Отримані результати показують, що жоден з досліджуваних макроелементів живлення рослин не є аналогом ^{137}Cs відносно переходу до рослин.

Ключові слова: надходження ^{137}Cs до рослини, ґрунтовий розчин, гамма-спектроскопія, атомний емісійний спектрометр з індуктивно зв'язаною плазмою

*E-mail: prorok@univ.kiev.ua

V.V. Prorok, senior researcher,
T.I. Makarenko, main specialist,
L.Yu. Melnichenko, senior
researcher.

**Investigation of connection
between plant ^{137}Cs uptake and
content of the soil solution**

Different fast-ripening plants were grown simultaneously at three experimental lands at natural conditions at Chornobyl Exclusion Zone, mixed together. Content of ^{137}Cs , K, Ca, Mg and Na in the plants and in the corresponding soil solutions were measured. Results of investigations show that none of the chemical macroelements of plants' nutrition is an analog of ^{137}Cs in respect of transition from soil to plant.

Key Words: plant's ^{137}Cs uptake, soil solution, gamma-spectroscopy, atom emission spectrometer with inductively coupled plasma.

Вступ. Проблема надходження радіонуклідів до рослин є актуальною для багатьох країн, тому що завжди є можливість аварії типу Чорнобильської. Більш того, ґрунт може бути забруднено радіонуклідами також іншими шляхами.

На цей час однією з найбільш гострих проблем є надходження до рослин довгоживучого ізотопу ^{137}Cs . У багатьох підручниках та оглядових статтях [1-3] вказується, що поглинання рослиною даного хімічного елементу, у тому числі й ^{137}Cs , залежить від її біологічних властивостей, складу ґрунтового розчину, рН ґрунтового розчину, температури, вологості ґрунту, наявності мікроорганізмів у ґрунті й т.п. Є багато підходів для передбачення надходження ^{137}Cs до рослини. Але жоден з них не є загальноприйнятим, тому дослідження цього питання продовжуються.

У оглядовій роботі [2] її автори на основі публікацій останніх років стверджують, що, можливо, концентрація радіонукліду у рослині залежить у першу чергу не від абсолютної концентрації радіонукліду у ґрунті, а від

концентраційних відношень цього радіонукліду до інших мікро- та макроелементів живлення рослин. В оглядових роботах [2,3] наведено багато посилянь, де автори розглядають К як аналог ^{137}Cs відносно їх надходження до рослин. У роботі [4] досліджувалась кореляція відношення $^{137}\text{Cs} / (\text{K}, \text{Ca}, \text{Mg}, \text{Na})$ у рослинах та цього ж відношення для обмінних ^{137}Cs та вказаних макроелементів живлення рослин у ґрунті. Встановлено, що ці відношення мають високу або дуже високу кореляцію. Це легко пояснити, бо більшість дослідників погоджується з тим, що при інших рівних умовах надходження радіонукліду до даного виду рослин на даному ґрунті пропорційне забрудненню ґрунту цим радіонуклідом, якщо ми маємо справу з мікроконцентраціями радіонукліда у ґрунті. Але такий кореляційний зв'язок не дозволяє передбачити надходження радіонукліду в рослину у кожному конкретному випадку.

Ми вважаємо, що в даний момент надходження ^{137}Cs до рослини визначається саме характеристиками ґрунтового розчину, а не ґрунту. Тому мета даної роботи - дослідити зв'язок між вмістом ^{137}Cs та основних елементів живлення рослин (металів) у рослині та у ґрунтовому розчині.

Методика експерименту. Дослідження проводилися у 2002 та 2003 роках у польових умовах на трьох дослідних ділянках, що розташовані у Брагінському районі Гомельської області (Беларусь):

-ділянка А – дерено-підзолистий піщаний ґрунт, забруднення по ^{137}Cs 980 кБк/м²;

-ділянка В – торф'яно-болотний низинного типу ґрунт, забруднення по ^{137}Cs 13 000 кБк/м²;

-ділянка С – дерено-підзолистий супіщаний ґрунт, забруднення по ^{137}Cs 620 кБк/м².

Висівалися скороспілі культури редис (*raphanus sativus*), салат (*lactuca sativa*), крес-салат (*lepidium sativum*). Ми сіяли їх на дослідних ділянках впереміжку. Корені цих рослин були у ґрунті поряд. Висів цих рослин було зроблено кілька разів на протязі сезону. Крім культурних рослин, ми відбирали також зразки дикоростучих трав на цих самих ділянках. Це були пирій повзучий (*elytrigia repens*), тимофіївка (*phleum pratense*), гірчак (*polygonum hydropiper*), кропива (*urticaceae dioica*), суріпка (*barbarea vulgaris*), березка польова (*convolvulus arvensis*), чистець болотний (*stachys palustris*). Рослини відбиралися до стадії їх цвітіння. Одночасно на всіх дослідних ділянках також відбиралися проби ґрунту. З ґрунту екстрагувався ґрунтовий розчин за допомогою центрифуги РС-6. Доцентрове прискорення при цьому дорівнювало 3000 g.

Центрифугований розчин фільтрувався спочатку скрізь скляний фільтр Whatman GF/A, а потім скрізь фільтр ТУ 6-09-1678-86.

Ми вимірювали вміст ^{137}Cs та К, Са, Mg, Na у висушених рослинах та у відповідних ґрунтових розчинах та вологість ґрунту на момент відбору

зразків. Вологість ґрунту h на момент відбору зразків визначалася як відношення маси води до маси сухого ґрунту у даному зразку ґрунту. Вміст ^{137}Cs у зразках вимірювався за допомогою гама-спектрометра "ORTEC". Вміст вказаних хімічних елементів у зразках вимірювався за допомогою оптичного емісійного спектрометра з індуктивно зв'язаною плазмою "Spectro" (Німеччина).

Похибка вимірювань вмісту ^{137}Cs для більшості зразків становила – 5-10%, вмісту хімічних елементів у зразках – 0,5%.

Більш детально методика експерименту описана у роботі [5].

Експериментальні результати та їх обговорення. У таблицях 1–3 представлені отримані експериментальні результати для всіх дослідних ділянок. Тут наведені назва та номер зразка, дата відбору, вологість ґрунту на момент відбору зразків рослини та ґрунту та на момент екстракції ґрунтового розчину, вміст ^{137}Cs а також усіх основних елементів живлення рослин (металів) у досліджуваних зразках.

Таблиця 1

Поле А. Вміст К, Са, Mg, Na та ^{137}Cs у зразках ґрунтових розчинів та висушених рослин, вологість ґрунту на момент відбору зразків рослин та ґрунту та на момент екстракції ґрунтового розчину

Soil humidity	Date	Sample	Sample №	Ca mg/g	K mg/g	Mg mg/g	Na mg/g	^{137}Cs Bq/kg
$h=0,11$	09June2002	Soil solution	26	0,0190	0,0070	0,0075	0,0051	8
-- " --	09June2002	<i>Phleum pratense</i>	58	1,53	20,96	1,35	0,081	5276
$h=0,062$	22June 2002	Roots of <i>raphanus sativus</i>	55	6,16	64,70	4,55	1,89	1746
-- " --	22June 2002	Leaf of <i>raphanus sativus</i>	65	15,54	43,49	7,73	1,40	2018
-- " --	22June 2002	<i>Lepidium sativum</i>	67	9,90	48,30	5,23	0,85	4540
$h=0,65$	14July 2002	Soil solution	22	0,0356	0,0282	0,0172	0,0101	7,9
$h=0,094$	14July 2002	<i>Phleum pratense</i>	75	1,93	12,15	0,59	0,153	5725
-- " --	14July 2002	<i>Stachys palustris</i>	76	4,19	27,67	1,07	0,110	10206
$h=0,29$	08June 2003	Soil solution	5	0,0536	0,0214	0,0276	0,0148	4,9
$h=0,016$	08June 2003	<i>Raphanus sativus</i>	35	13,81	52,34	3,985	0,367	216
-- " --	08June 2003	<i>Lepidium sativum</i>	36	8,36	38,28	3,682	0,157	265
-- " --	08June 2003	<i>Lactuca sativa</i>	37	7,41	52,617	3,606	0,485	672
-- " --	08June 2003	<i>Stachys palustris</i>	38	5,21	29,774	3,258	0,091	606
$h=0,30$	13July 2003	Soil solution	8	0,0593	0,0217	0,0492	0,0125	3,2
$h=0,035$	13July 2003	<i>Lactuca sativa</i>	21	12,18	47,39	5,67	0,6846	585
-- " --	13July 2003	<i>Polygonum hydropiper</i>	22	7,6	34,07	15,28	0,1661	679
-- " --	13July 2003	<i>Stachys palustris</i>	24	5,57	32,35	8,7	0,1116	1722

Таблиця 2

Поле В. Вміст К, Са, Mg, Na та ^{137}Cs у зразках ґрунтових розчинів та висушених рослин, вологість ґрунту на момент відбору зразків рослин та ґрунту та на момент екстракції ґрунтового розчину

Soil humidity	Date	Sample	Sample №	Ca mg/g	K mg/g	Mg mg/g	Na mg/g	^{137}Cs Bq/kg
h=2,35	09June 2002	Soil solution	24	0,0337	0,0045	0,0041	0,0046	61
-- " --	09June 2002	<i>Urticaceae dioica</i>	59	18,12	11,42	6,516	0,0924	609400
-- " --	09June 2002	<i>Polygonum hydropiper</i>	60	8,55	23,56	7,267	0,1245	606600
h=3,20	22June 2002	Soil solution	19	0,145	0,007	0,0172	0,0070	40,8
h=2,6	22June 2002	Roots of <i>raphanus sativus</i>	54	8,95	39,29	2,94	3,459	240760
-- " --	22June 2002	Leaf of <i>raphanus sativus</i>	64	34,46	26,84	3,969	3,209	414700
-- " --	22June 2002	<i>Lepidium sativum</i>	68	15,24	39,8	3,264	1,478	758800
-- " --	22June 2002	<i>Polygonum hydropiper</i>	69	13,80	18,71	9,826	0,222	305700
h=3,20	14July 2002	Soil solution	23	0,0586	0,0047	0,0081	0,0106	95
h=1,46	14July 2002	<i>Urticaceae dioica</i>	72	14,79	6,704	4,136	0,1005	230900
-- " --	14July 2002	Motley grass	73	9,26	9,522	1,852	0,1142	617500
h=1.38	08June 2003	Soil solution	6	0,2679	0,0217	0,0215	0,0121	44,3
h=0.45	08June 2003	<i>Lactuca sativa</i>	39	18,24	31,28	4,48	2,408	35911
-- " --	08June 2003	Blades of <i>elytrigia repens</i>	41	3,80	17,03	1,03	0,165	47741
-- " --	08June 2003	<i>Urticaceae dioica</i>	42	37,99	12,79	6,44	0,109	55260
-- " --	08June 2003	<i>Polygonum hydropiper</i>	43	21,40	17,5	7,04	0,100	118888
h=0.72	13July 2003	Soil solution	9	0,3045	0,020	0,0521	0,0025	27
h=0.72	13July 2003	<i>Lactuca sativa</i>	26	16,43	40,25	7,00	2,106	64924
-- " --	13July 2003	<i>Raphanus sativus</i>	27	30,58	49,78	4,65	1,978	26130
-- " --	13July 2003	<i>Polygonum hydropiper</i>	28	21,49	24,06	9,24	0,078	54348
-- " --	13July 2003	Blades of <i>elytrigia repens</i>	29	5,27	27,18	2,56	0,021	36505

На основі даних, що наведені у таблицях 1 – 3, була порахована величина $(^{137}\text{Cs}/\text{K})_p / (^{137}\text{Cs}/\text{K})_{ss}$ для всіх досліджуваних рослин та ґрунтових розчинів, де $(^{137}\text{Cs}/\text{K})_p$ – відношення вмісту ^{137}Cs та К у рослині, $(^{137}\text{Cs}/\text{K})_{ss}$ – відношення вмісту ^{137}Cs та К у ґрунтовому розчині. Ця величина представлена на Fig.1.

Аналогічні відношення для Са, Mg та Na представлені на Рис.2 – 4.

Як видно з Рис.1, величина $(^{137}\text{Cs}/\text{K})_p / (^{137}\text{Cs}/\text{K})_{ss}$, що відповідає різним датам відбору, різним ділянкам та різним видам рослин, змінюється на протязі двох сезонів у діапазоні, що перевищує два математичні порядки. Для всіх інших макроелементів живлення рослин діапазон зміни аналогічного відношення теж не менший, ніж два математичні порядки (див. Рис.2-4).

Таблиця 3.

Поле С. Вміст К, Са, Mg, Na та ¹³⁷Cs у зразках рослин та ґрунтових розчинів, вологість зразків на момент відбору зразків рослин та ґрунту та на момент екстракції ґрунтового розчину

Soil humidity	Date	Sample	Sample №	Ca mg/g	K mg/g	Mg mg/g	Na mg/g	¹³⁷ Cs Bq/kg
h=0,34	09June 2002	Soil solution	12	0,0513	0,0475	0,0186	0,0063	4,8
h=0,069	09June 2002	<i>Barbarea vulgaris</i>	61	7,41	32,26	2,333	0,316	5212
— " —	09June 2002	<i>Convolvulus arvensis</i>	62	5,77	36,52	1,860	0,102	7772
h=0,15	08June 2003	Soil solution	4	0,0231	0,0475	0,0054	0,0201	1,9
	08June 2003	Leafs of <i>raphanus sativus</i>	31	12,48	40,203	2,187	0,271	82
	08June 2003	<i>Lepidium sativum</i>	32	3,96	25,675	1,734	0,131	65
	08June 2003	<i>Convolvulus arvensis</i>	34	6,80	34,455	1,863	0,124	93
h=0,12	13July 2003	Soil solution	7	0,0178	0,0528	0,0081	0,0152	7,1
	13July 2003	Leafs of <i>raphanus sativus</i>	16	9,96	50,7	3,25	0,3304	164
	13July 2003	<i>Convolvulus arvensis</i>	19	5,81	38,09	2,02	0,0763	165
	13July 2003	<i>Barbarea vulgaris</i>	20	9,94	31,61	2,94	0,0901	105

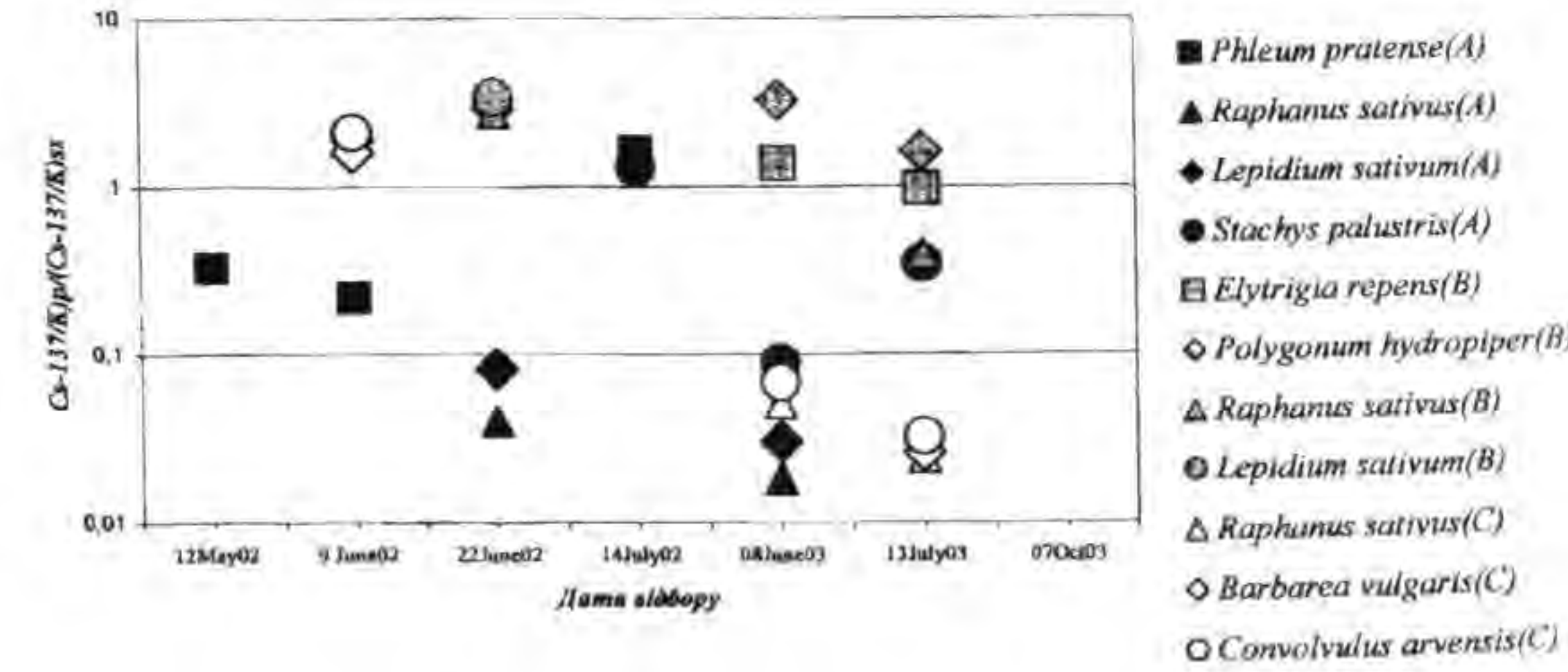


Рис.1. Величина $(^{137}\text{Cs}/\text{K})_p / (^{137}\text{Cs}/\text{K})_{\text{ex}}$ для усіх досліджуваних ділянок для різних дат відбору зразків рослин та ґрунтів.

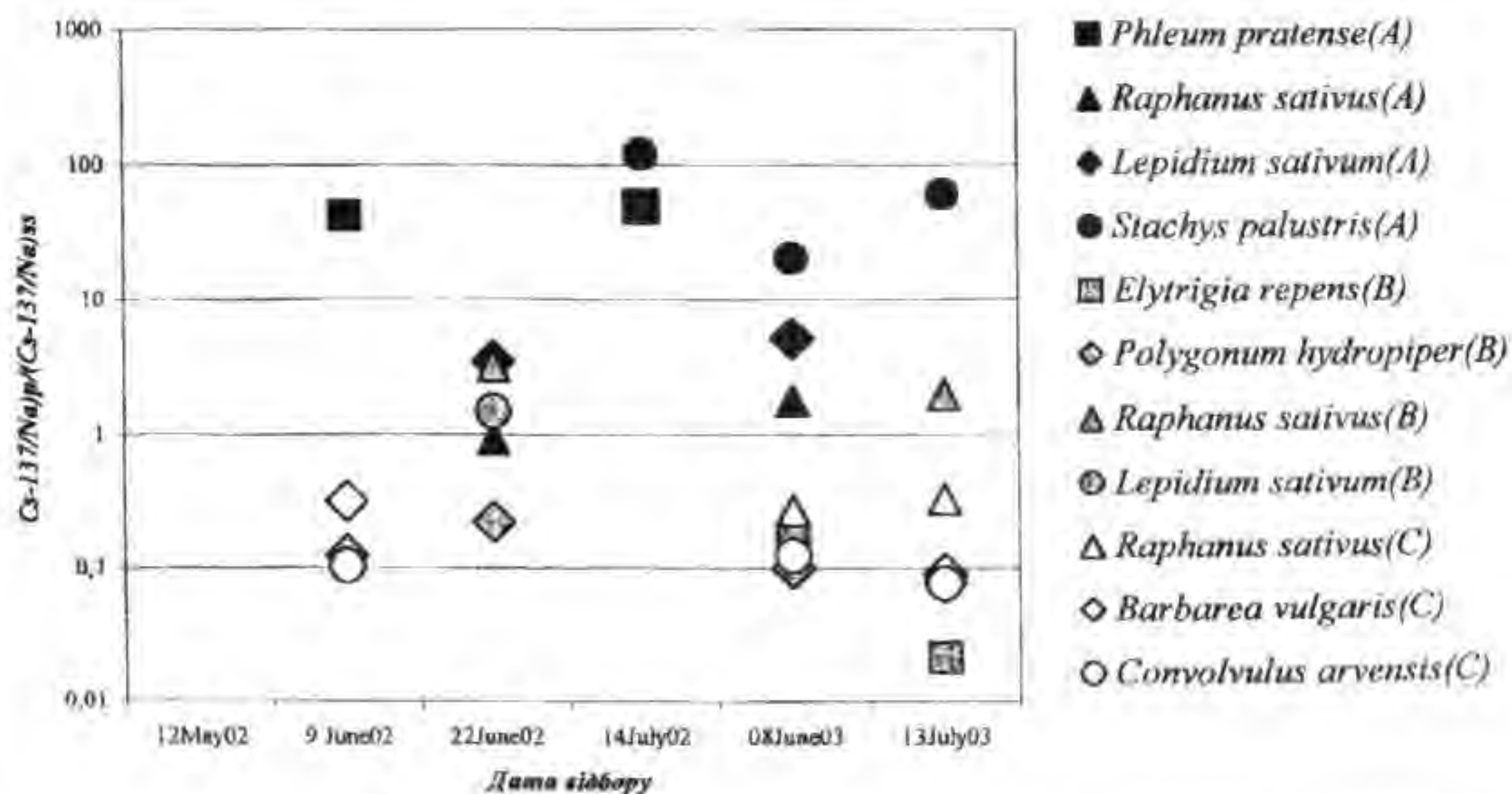


Рис.4. Величина $(^{137}\text{Cs}/\text{Na})_p / (^{137}\text{Cs}/\text{Na})_s$ для усіх досліджуваних ділянок для різних дат відбору зразків рослин та ґрунтів.

З цього випливає, що механізми надходження до рослини ^{137}Cs та досліджуваних елементів макроживлення рослин у нашому експерименті є різними. Жоден з досліджуваних елементів макроживлення рослин не є аналогом ^{137}Cs відносно надходження до рослини.

Робота виконана за фінансової підтримки НТЦУ (проект 2390).

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Агроэкология. Під ред. В.А. Чернікова та А.І. Чекереса. Москва, "Колос", 2000, 675с.
2. Ehlken S., Kirchner G. Environmental processes affecting plant root uptake of radioactive trace elements and variability of transfer factor data: a review. J. Environ. Radioact., 2002, **58**, 97-112.
3. Frissel M.J. et al. Generic values for soil-to-plant transfer factors of radiocesium. // J. Environ. Radioact. 2002. - v.58.- p.113-128.
4. Skarlou V., Papanicolaou E.P., Nobeli C. Soil to plant transfer of radioactive cesium and its relation to soil and plant properties.// Geoderma. -1996.-V.72.- P.53-63.
5. Пророк В.В., Масон К.Ф.В, Тімофєєв С.Ф., Макаренко Т.І., Мельниченко Л.Ю. Стронцій-кальцієве відношення для стабільних стронцію та кальцію у рослині та у ґрунтовому розчині. Вісник Київського ун-ту, 2003. №1. с.399-405.

Надійшла до редколегії 12.10.05

УДК 550.388.2

Юрій Г. Рапопорт, докторант
фізичного факультету Київського
національного університету імені
Тараса Шевченка

**Іоносферний відгук на
просторовий пакет атмосферних
гравітаційних хвиль з нижньої
атмосфери.**

Автором отримані ефективні граничні умови для збудження атмосферних гравітаційних хвиль (АГХ) приповерхневим літосферним джерелом. Запропоновано послідовно враховувати спектральні особливості пакету АГХ, включаючи реактивні моди. Показана просторова асиметрія відгуку в F області іоносфери в середніх широтах у нахиленому магнітному полі. Показано, що максимальний відгук має місце при періоді витягнутого літосферного джерела (у двовимірній моделі поширення АГХ) порядку 80 хв. Отримані вперше дані по залежності іоносферного відгуку на АГХ, випромінені джерелом складної просторової форми, від орієнтації джерела відносно геомагнітного поля (у трьохвимірній моделі). Отримані перші чисельні результати застосування нової чисельної моделі для відгуку приекваторіальної атмосфери з нестійкістю Релея-Тейлора, що добре якісно узгоджуються з результатами супутникових спостережень.

Ключові слова: іоносферний відгук, просторовий пакет, атмосферні гравітаційні хвилі, нестійка іоносфера.

E-mail:

Yuriy G. Rapoport, doctorant, Kiev
Taras Shevchenko National
University, physics faculty

**Ionospheric response to the spatial
packet of atmospheric gravity
waves from the lower atmosphere.**

Boundary conditions for excitation of atmospheric gravity waves (AGW) by the lithospheric source are obtained. Spectral peculiarities of the excited AGW including reactive modes are taken into account. Spatial asymmetry of the ionospheric response in the oblique geomagnetic field and presence of the maximum of dependence of the ionospheric response on the AGW period are shown. Peculiarities of the ionospheric response connected with the spatial shape of the lithospheric source are considered. The first results of the new numerical model for the response of unstable near-equatorial ionosphere correspond qualitatively well to the data of satellite observations.

Key words: ionospheric response, spatial packet, atmospheric gravity waves, unstable ionosphere.

laser@i.kiev.ua

Вступ. Останнім часом з'явилися експериментальні докази наявності сейсмоіоносферної взаємодії як напередодні, так і після потужних землетрусів. Імовірним «фізичним агентом», що забезпечує сейсмоіоносферну взаємодію в цих випадках, є АГХ. Йдеться, зокрема, про

появу напередодні потужних землетрусів дуже схожих коливань з часовими періодами, типовими для АГХ, в спектрах приповерхневого вертикального електричного поля та «атмосферних шумів» (тобто електромагнітних хвиль з частотами порядку 5-10 кГц, що збуджуються блискавками і поширюються в хвильоводі «Земля-Іоносфера») [1]. В роботі [2] були виділені збурення іоносферної концентрації з характерними просторовими періодами порядку 600-800 км після потужних землетрусів в приекваторіальній області F іоносфери. У зв'язку з актуальним обговоренням «акусто-гравітаційного» каналу сейсмоіоносферної взаємодії, слід згадати також виникнення за декілька годин-днів до потужних землетрусів варіації іоносферних світінь з характерними для АГХ періодами від десятків хвилин до години [3]. З використанням спостережень на антарктичній станції «Академік Вернадський» було показано [4], що АГХ, які збуджуються циклонами, досягають іоносфери, призводять до варіацій іоносферних струмів, і відповідні коливання магнітного поля переносяться вздовж силової лінії геомагнітного поля і реєструються в магніто-спряженій точці. Таким чином, є актуальною задача побудови моделі збудження АГХ приповерхневим джерелом скінчених розмірів і іоносферного відгуку на відповідний просторовий пакет АГХ (якщо джерело вважається монохроматичним), а також вивчення фізичних характеристик такого іоносферного відгуку. В даній роботі розглянутий відгук на просторовий пакет АГХ, що збуджується в нижній атмосфері, в F області іоносфери. Підсумовуються результати, отримані автором даної роботи, на основі запропонованої і розвинутої ним двовимірної моделі збудження АГХ та іоносферного відгуку на середніх широтах [5-8]. Наводяться нові результати тривимірного моделювання відгуку на середніх широтах, а також двовимірного моделювання відгуку нестійкої екваторіальної F області на основі розвитку моделі [9].

Граничні умови для АГХ, реактивні моди та іоносферний відгук на середніх широтах. АГХ в нижній атмосфері можуть збуджуватися за рахунок коливань земної поверхні, викликані землетрусами, коливань тиску, пов'язаних з циклонами, та в інших ситуаціях. В першому випадку доцільно задавати в нижній атмосфері (біля Земної поверхні) вертикальну швидкість, в другому - тиск. Перед потужними землетрусами можливим сценарієм виникнення АГХ є підвищене виділення газів, зокрема парникових (наприклад CO_2), промодульованих сейсмогравітаційними коливаннями Землі з періодом порядку 1 години [10]. Для цього випадку введемо аналітично граничні умови для задачі збудження АГХ в системі «літосфера-атмосфера». При цьому, строго кажучи, є три фізичних чинники, що спричиняють до збудження коливань в атмосфері: періодична зміна концентрації, тиску та температури, що обумовлені виділенням

парникових газів. Зауважимо, що інфрачервоне випромінення, яке супроводжує сейсмогенні зміни температури в приповерхневому шарі атмосфери, реєструється з супутників [11]. Цю ситуацію можна змоделювати за допомогою системи рівнянь для АГХ в ідеальній атмосфері [12], але з джерелами температури, маси та тиску («сили»):

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\vec{v}}{dt} &= -\vec{\nabla} p + \rho \vec{g} + \rho \vec{F}, & \frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \vec{v} &= q, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \vec{v} \vec{\nabla} p &= c_s^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \vec{\nabla} \rho \right) + A\rho, \end{aligned} \quad (1)$$

де ρ , $\vec{v}$, p , $\vec{g}$ та c_s - густина, швидкість та тиск нейтральної атмосфери, прискорення вільного падіння та швидкість звуку відповідно, $d/dt \equiv \partial/\partial t + \vec{v} \vec{\nabla}$, $\vec{e}_z$ та $\vec{F} = F_z \vec{e}_z$ - одиничний вертикальний вектор (в вертикальному напрямку z) та силова функція відповідно, $q(\vec{r}, t)$ та $A(\vec{r}, t)$ - густини масового та теплового джерел відповідно, що визначаються газами, які виділяються з літосфери. Для виведення граничних умов, припустимо для спрощення, що парникові гази зосереджені в тонкому приповерхневому газовому шарі $z_a \leq z \leq z_b$ («шарі літосферних газів»), нижня границя якого співпадає з поверхнею літосфери, $z_a = 0$, а координата верхньої границі цього шару є $z_b = \Delta z_0$ де $z_0 = \Delta z_0$ - товщина шару літосферних газів. Далі розглядається випромінення гідродинамічних хвиль з газового шару в напівнескінчену атмосферу і напівнескінчену літосферу, що вважається ізотропним пружним середовищем зі скінченими пружними сталими λ, μ . Хвильове рівняння для такого середовища має вигляд $\rho d^2 \vec{U} / dt^2 = \mu \Delta \vec{U} + (\lambda + \mu) \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{U}$, швидкість зміщення часток середовища дорівнює $\vec{v} = \partial \vec{U} / \partial t = i\omega \vec{U}$ (використовується лінійне наближення і приймається залежність від часу $\sim e^{i\omega t}$, де ω - частота джерела АГХ). В літосферу випромінюються дві пружні хвилі - поперечна і довжня, з горизонтальною компонентою хвильового числа k_x (що дорівнює відповідній компоненті хвильового числа в атмосфері) і $k_{x1,2}$, такими, що $\omega^2 = (\mu/\rho)(k_x^2 + k_{x1}^2)$, $\omega^2 = [(\lambda + 2\mu)/\rho](k_x^2 + k_{x2}^2)$ [13]. Граничні умови мають вигляд [13] $\sigma_{ij} n_j|_{z=z_a, -0} = \sigma_{ij} n_j|_{z=z_a, +0}$, $v_z|_{z=z_a, -0} = v_z|_{z=z_a, +0}$, $p|_{z=z_a, -0} = p|_{z=z_a, +0}$ (мається на увазі сумування по індексам, що повторюються). Тут n_j - j - та компонента нормалі до відповідної поверхні розділу між середовищами (в нашій геометрії $j = z$); у двовимірному випадку, коли АГХ поширюються в площині xz , $i = x, z$. Тензор напруг σ_{ij} в літосфері має вигляд $\sigma_{ij} = 2\mu U_{ij} + \lambda \operatorname{div} \vec{U} \delta_{ij}$, $U_{ij} = 0.5(\partial U_i / \partial x_j + \partial U_j / \partial x_i)$. В газовому

середовищі усереднені шару літосферних газів, $z_0 \leq z \leq z_b$, та в атмосфері над цим шаром, $z > z_b$, $\sigma_y = -p\delta_y$. В результаті вирішення задачі про випромінення гідродинамічних хвиль газовим джерелом в атмосферу і літосферу, отримуємо для швидкості на верхній границі газового шару

$$v_z^b = [p_0 \Delta P_s + \frac{S}{\omega(\beta_1 + a)} \Delta v_{z_s}] / [p_0 R_p + \frac{S}{\omega(\beta_1 + a)}]. \quad (2a)$$

$$\text{Тут } \Delta v_{z_s} = \int_0^{\Delta z_0} \left(\frac{A}{gH} + \gamma_0 \frac{q}{\rho_0} \right) dz, \quad \Delta P_s = \frac{1}{gH} \int_0^{\Delta z_0} \left(F_z + D_z^{-1} \frac{A}{\gamma H} \right) dz, \quad (2b)$$

$$R_p(k_z) = -[D_z - gD_z^{-1} \left(D_z - \frac{1}{H} \right)] / [gH \left(D_z - \frac{1}{H} \right) + gD_z^{-2} D_z^2],$$

$$D_x = -ik_x, \quad D_y = -ik_y, \quad D_z = -ik_z, \quad S = \lambda(k_x + k_{x1}\beta_1) + 2\mu k_{x1}\beta_1 + a[\lambda(k_x\alpha_1 + k_{x2}) + 2\mu k_{x2}],$$

$$a = -(k_{x1} + k_x\beta_1)/(k_{x2}\alpha_1 + k_x), \quad \beta_1 = -k_x/k_{x1}, \quad \alpha_1 = k_x/k_{x2}, \quad \rho_0, p_0 - \text{стаціонарні}$$

значення густини та тиску на рівні літосфери, $z = 0$, H - висота однорідної атмосфери, γ_0 - адіабатична стала. У наближенні нескінченно жорсткої літосфери, $\lambda, \mu \rightarrow \infty$ граничні умови зводяться до вигляду $v_z^a = 0$, $v_z^b = \Delta v_{z_s}$.

Як показує аналіз, у випадку газового джерела на основі парникових газів [10], основний вклад в ефективні джерела (2b) дає теплове джерело в правій частині третього рівняння (1), пропорційне $A \sim \Delta T$, де ΔT - амплітуда температурних осциляцій (яка може досягати 3К відповідно до [10]). Маємо остаточно для теплового джерела граничну умову

$$v_z^b = \Delta v_{z_s} = \frac{A}{gH} \Delta z_0 = \frac{\omega \Delta z_0}{gH} \frac{k_B \Delta T}{m_n} f(x, y), \quad (3)$$

де k_B, m_n - стала Больцмана та маса молекули нейтральної атмосери відповідно, $f(x, y)$ - функція, що описує розподіл джерела у горизонтальній площині $z = 0$. Надалі буде розглядатися функція $f(x, y)$ у формі «дзвона». Зауважимо, що (3) годиться як ефективна гранична умова також для коливань земної поверхні, що мають місце під час або після землетрусів.

Автор даної роботи вперше запропонував послідовно включити до розгляду збудження АГХ реактивні хвилі (надалі- реактивні моди (РМ)) в [5, 6]. Як буде показано, послідовне врахування всього спектру АГХ включаючи і спектральну область РМ є важливим для правильного розрахунку іоносферного відгуку. Розрахунки проводяться за допомогою введення фіктивних «бічних стінок», розташованих настільки далеко від

області, де розташоване джерело, що вони не впливають на поширення АГХ в області, де провадяться дослідження, і розкладу поля в ряд Фур'є в горизонтальній площині. Згідно з [12], дисперсійне рівняння для двовимірних АГХ можна представити у вигляді

$$k_{zm}' = \pm \sqrt{k_{xm}^2 \left(\frac{\omega^2}{\omega_b^2} - 1 \right) + \frac{\omega^2}{c_s^2} - \frac{1}{4H^2}} \quad (4)$$

де k_{xm} - значення горизонтального хвильового числа моди Фур'є поля АГХ з номером m , $k_{zm} = \frac{i}{2H} + k_{zm}'$, k_{zm}' - дійсна частина вертикального

хвильового числа, $\omega_b = g\sqrt{\gamma_0 - 1}/c_s$ - частота Брента-Вайсяля [12]. Як випливає з (4), для мод з горизонтальними хвильовими числами, що задовольняють умові $|k_{xm}| < k_{x0} \approx \omega/(2H\omega_b)$ (тут враховано, що для періодів порядку 1 год., $\omega/\omega_b \gg 1$, $1/4H^2 \gg \omega^2/c_s^2$), вертикальні хвильові числа є чисто уявними, відповідні моди реактивно затухають (у відсутності дисипації) у вертикальному напрямку і називаються тут РМ. Згідно з [9], поблизу спектральної границі $|k_{xm}| = k_{x0}$ між модами, що поширюються (вгору) і РМ, але з боку РМ, а саме при $|k_x| = k_{x1} = \omega/\sqrt{\gamma_0 gH}$, $k_{x1} < k_{x0}$, знаходиться точка «амплітудного резонансу», в якій при заданій (наприклад, відповідно до граничної умови (3)) величині v_z (вертикальної швидкості АГХ) маємо $|v_z/v_z| \rightarrow \infty$.

Автором даної роботи отримано такий вираз [6-8] для відгуку середньопрошаркової іоносфери (а саме, відносної зміни електронної концентрації) на просторовий пакет АГХ, що поширюється з нижньої атмосфери, у наближенні поздовжнього дрейфу [14] з урахуванням вітру на іоносферних висотах:

$$N_{em}' / N_{e0} = \frac{G}{D}, G = (iK_H - e_{Hz} \frac{1}{L_{ef}}) v_H, \quad (5a)$$

$$D = D_i + D_a K_H^2 + iK_H [e_{Hz} \frac{\partial D_a}{\partial z} + \frac{g \cos \theta}{v_m} - U_H] + \alpha$$

Тут N_{e0} - стаціонарне значення електронної концентрації на відповідній висоті, N_{em}' - амплітуда m -ї моди Фур'є збурення електронної концентрації (у тривимірному випадку індекс m замінюється на подвійний індекс, що відповідає двовимірному перетворенню Фур'є в горизонтальній площині), v_H , U_H - проекції на напрямок геомагнітного поля швидкостей АГХ та вітру, відповідно, D_a та v_m - коефіцієнт амбіполярної дифузії та частота зіткнень іонів з нейтралами, відповідно, $L_{ef} = \frac{1}{N_{e0}} \frac{\partial N_{e0}}{\partial z}$, $K_H = \vec{e}_H \cdot \vec{K}$,

$\vec{K}_H = (k_{zm}, 0, k_{zm})$ (для двовимірного випадку), θ - кут між напрямком геомагнітного поля та напрямком вертикально вгору, $\vec{e}_H$ - одиничний вектор у напрямку геомагнітного поля, $e_{Hz} = \cos \theta$, α - коефіцієнт рекомбінації. Після «збирання» компонент перетворення Фур'є маємо для іоносферного просторового розподілу іоносферного відгуку у двовимірному випадку:

$$\frac{N'_e}{N_{e0}}(x, z) = e^{z/(2H)} \sum_{m=-N_x/2}^{N_x/2} [N'_{em} / N_{e0}] e^{-ik_{em}x - ik_{zm}z}, \quad (56)$$

де N_x визначає кількість мод, що враховується. Для узагальнення на тривимірний випадок, потрібно в (56) застосувати двовимірне перетворення Фур'є в горизонтальній площині.

Результати чисельних розрахунків для відгуку середньозширотної області F на просторовий пакет АГХ. Ефекти анізотропії іоносферного відгуку в нахиленому геомагнітному полі (поле нахилене в сторону позитивних значень координати X), отримані при послідовному врахуванні особливостей спектру АГХ літосферногшо походження, включаючи наявність в спектрі РМ, показані на Рис. 1а.

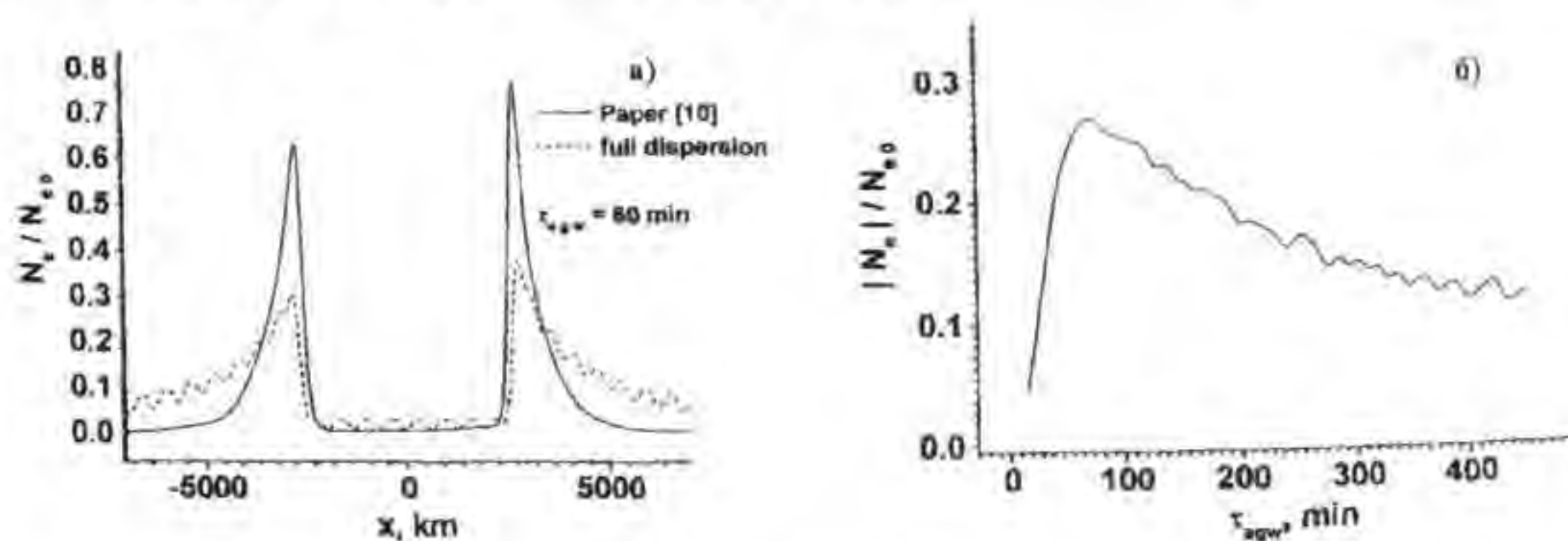


Рис. 1. а) Відгук F області ($Z = 250$ км) середньозширотної іоносфери на просторовий пакет АГХ. Період АГХ $\tau_{AGW} = 2\pi/\omega = 60$ хв., кут $\theta = 45^\circ$. Суцільна крива - розрахунок дисперсії за наближеним співвідношенням зі статті [10]; переривчаста крива - розрахунок за співвідношенням (4). б) Залежність максимального значення в просторовому розподілі відгуку від періоду АГХ. $\theta = 30^\circ$. Характерний горизонтальний розмір джерела АГХ- $l_x \sim 100$ км.

З рис. 1а видно, що є суттєва (в декілька разів) різниця між значеннями іоносферного відгуку в наближенні [10], коли в дисперсійному співвідношенні (4) знехтувано останнім членом в підкоренному виразі (суцільна крива) і значенням, що відповідає повному дисперсійному співвідношенню (4), коли враховується наявність в спектрі РМ, що значно затухають на висотах області F іоносфери. Для періоду АГХ 30 хв. різниця

між відповідними значеннями іоносферного відгуку досягає 3-4 разів, а різниця при розрахунку енергії АГХ, що випромінюються- порядку величини. Автором даної роботи на основі двовимірної моделі збудження АГХ (з «одновимірним» нескінченно витягнутим (в одному з горизонтальних напрямків) приповерхневим джерелом) показана наявність максимуму відгуку середньозіротної F області іоносфери на просторовий пакет АГХ (див. Рис. 1б і також [6, 8]). Цей максимум відповідає періоду АГХ порядку 80 хв. Аналогічний результат має місце і при випромінненні АГХ «подвійним двовимірним» джерелом, що має два максимуми з характерними горизонтальними розмірами $100 \times 300 \text{ км}^2$ кожний і з відстанню між максимумами 800 км (моделювання провадилось з використанням тривимірної моделі). Вивчався вплив «фактору форми» такого «подвійного двовимірного» джерела на іоносферний відгук з використанням тривимірної моделі. Показано, що тривимірний просторовий розподіл іоносферного відгуку має два максимуми (аналогічні максимумам двовимірного розподілу на Рис. 1а), кожний з яких є «роздвоєним», тобто форма іоносферного відгуку певною мірою відповідає формі літосферного джерела. За допомогою двовимірної моделі показано, що залежність максимуму відгуку «одинарного одновимірного» джерела (тобто нескінченно витягнутого в одному напрямку) з $l_x \sim 100 \text{ км}$ і одним просторовим максимумом має місце при куті $\theta \sim 80^\circ$, а для «подвійного одновимірного» джерела - при $\theta \sim 70^\circ$. Аналогічний результат має місце і для «подвійного двовимірного» джерела. Показано, що для такого джерела залежність максимуму просторового розподілу іоносферного відгуку від кута ϕ між напрямком «довгої вісі» джерела і горизонтальною проекцією геомагнітного поля є монотонною. Автором показані і пояснені якісно ефекти, що спричиняється вітром, при відгуку іоносфери на двовимірний просторовий пакет АГХ (Рис. 2; див. також [8]). З Рис. 2 видно, що кожний з просторових максимумів іоносферного відгуку є роздвоєним, у відповідності до наявності двох просторових максимумів форми літосферного джерела (яке є «подвоєним»). Наявність вітру призводить до того, що картина просторового розподілу іоносферного відгуку в цілому і кожний з просторових максимумів зсуваються у напрямку вітру; анізотропія розподілу (при умові, що вітер напрямлений в тому ж напрямку, куди нахилене геомагнітне поле), а також роздвоєність максимуму, що знаходиться при $X > 0$, підсилюються.

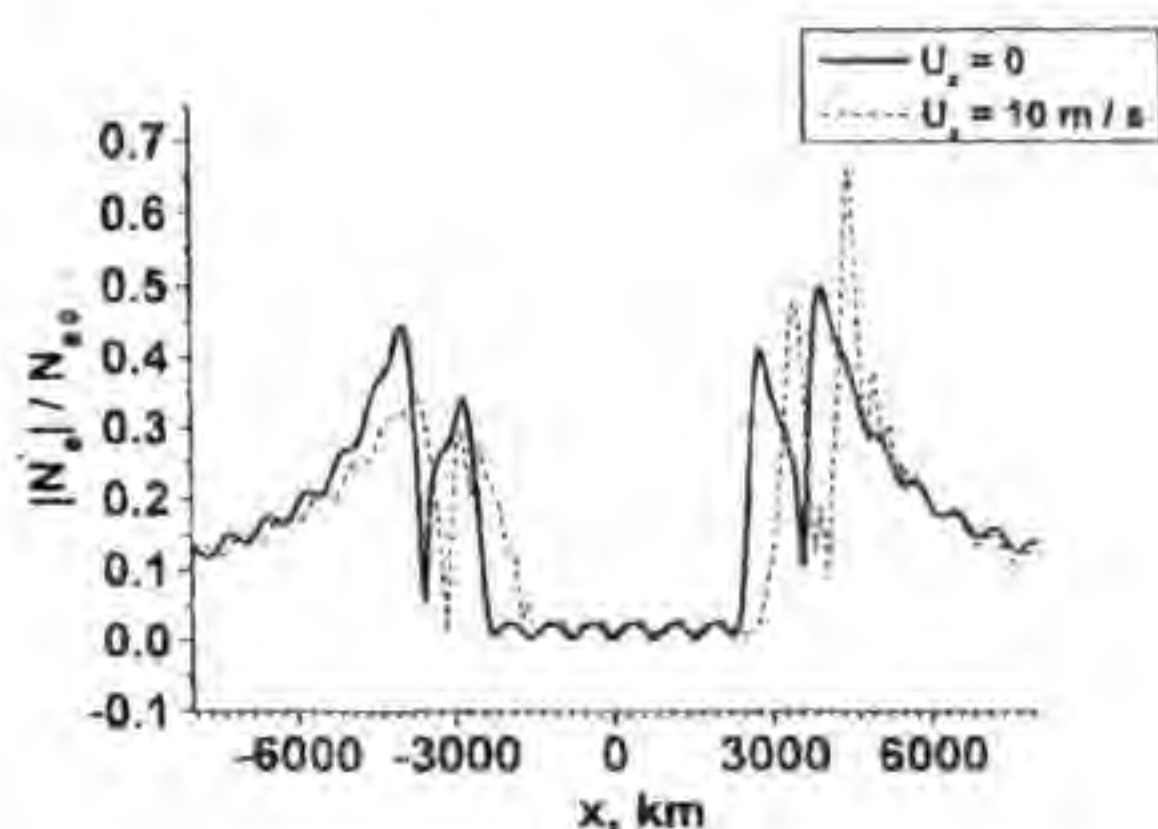


Рис. 2. Просторовий розподіл відгуку іоносфери на просторовий пакет АГХ, що випромінюються «подвійним» нескінченно витягнутим в одному з горизонтальних напрямків (а саме, в напрямку Y) літосферним джерелом у присутності вітру з горизонтальною швидкістю U_x . Для кожного з просторових максимумів джерела горизонтальний розмір $l_x = 100$ км, відстань від максимумами- 500 км, $\tau_{AGW} = 70$ хв.

Деякі чисельні результати двовимірного моделювання відгуку нестійкої приекваторіальної F області іоносфери на просторовий пакет АГХ. Теорія відгуку приекваторіальної іоносфери на просторовий пакет АГХ при наявності нестійкості Релея-Тейлора запропонована в [9], і ми не будемо тут зупинятися на теорії, а наведемо деякі результати чисельних розрахунків іоносферного відгуку за допомогою двовимірної моделі. Наводяться перші чисельні результати нової моделі, і повне чисельне дослідження всіх можливих режимів в усьому можливому діапазоні іоносферних параметрів на даний момент ще не проведене. Тим не менше, за допомогою запропонованої автором даної роботи оригінальної моделі показана можливість нових фізичних ефектів, а результати якісно узгоджуються з даними супутникових спостережень [2] збурень приекваторіальної іоносфери після потужних землетрусів. Рис. 3а,б відповідають відсутності вітру і присутності східного вітру, параметри вказані у підпису до Рис. 3. У першому випадку симетричні максимуми поля АГХ (відповідний рисунок не наведений в даній роботі) розташовані при $x \approx \pm 2000$ км, у другому випадку більший і менший максимуми поля АГХ розташовані при $x \approx 3500$ км і $x \approx -1000$ км відповідно. При параметрах, наведених на Рис. 3а,б, картина, що утворюється, в основному, пов'язана з динамічною взаємодією двох груп мод зі спектру, що ініціюється в плазмі у присутності просторового пакету АГХ літосферного походження, а саме: (1) стійких (дисипативних) мод плазових збурень, що лежать у вузькому спектральному діапазоні біля спектральної границі

$k_x \approx k_{x0}$, $\lambda_{x0} = 2\pi / k_{x0} \approx 800$ км між РМ і модами, що розповсюджуються вгору і (2) мод з від'ємними значеннями k_x , $|k_x| > (3 \div 5) |k_x / k_{x0}| \sim (5 \div 20)$ для випадків, показаних на Рис. 3а і 3б відповідно. При цьому є суттєвими спектральні особливості пакету АГХ літосферного походження, розглянуті вище в даній роботі і в [9], зокрема наявність РМ і мод, що розповсюджуються вгору, залежність граничного (між цими двома групами мод) значення хвильового числа, в основному, тільки від характеристик атмосфери і періоду літосферного джерела і наявність чітко виділеного максимуму в спектрі горизонтальної швидкості АГХ в області $k_x \approx k_{x0}$. Важливою є і залежність інкременту нестійкості Релея-Тейлора від параметрів іоносфери і вертикальної і горизонтальної компонент хвильового числа, розглянута в [9], зокрема можливість нестійкості у вузькій спектральній області поблизу $k_x \approx k_{x0}$ і при значеннях $|k_x / k_{x0}|$ порядку декількох одиниць з відповідним знаком k_x .

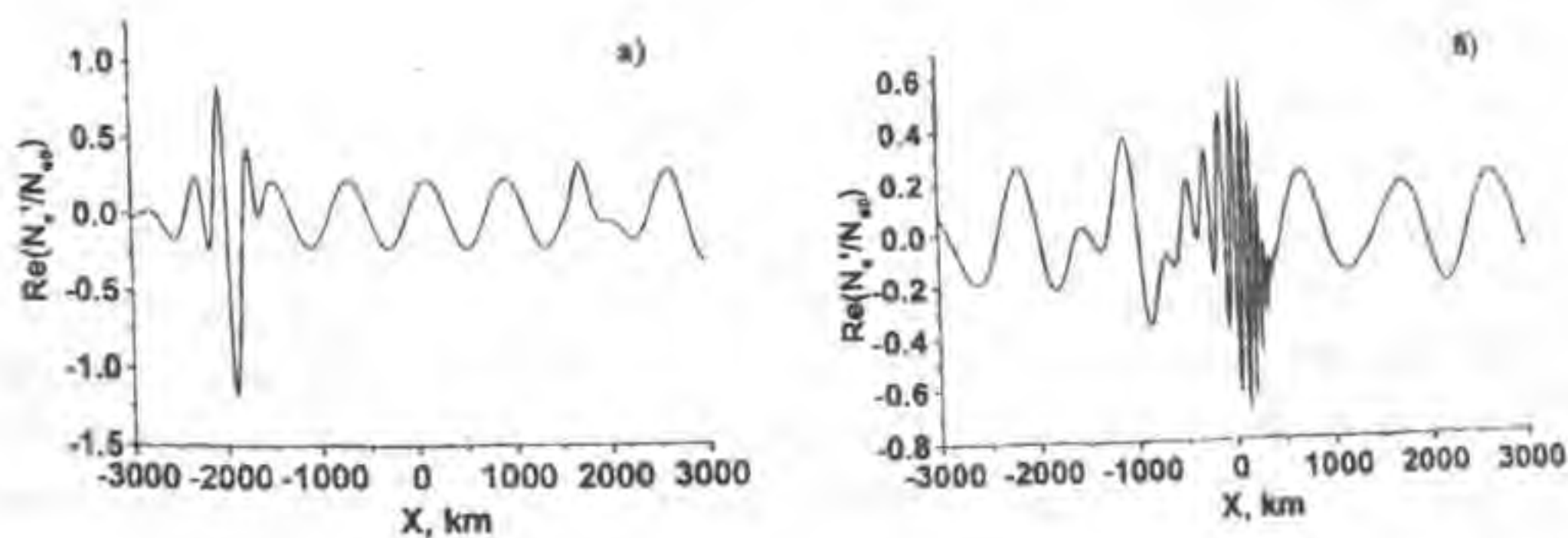


Рис. 3. Відгук нестійкої приекваторіальної F області іоносфери ($Z = 250$ км) на просторовий пакет АГХ з нескінченно витягнутим (в одному з горизонтальних напрямків, а саме паралельно горизонтальному геомагнітному полю) літосферним джерелом, що має характерний горизонтальний розмір в напрямку, перпендикулярному геомагнітному полю, $l_x \sim 100$ км і період $\tau_{AGW} = 40$ хв. Пакет двовимірних АГХ поширюється перпендикулярно геомагнітному полю. Напрямок від негативних до позитивних значень X відповідає напрямку «захід-схід». а) Вітер відсутній, горизонтальна швидкість іонів- $v_{i0x} = -50$ м/с, вертикальна швидкість іонів- $v_{i0z} = -10$ м/с; час, що пройшов з моменту «одночасного включення» впливу на іоносферу поля АГХ і ефектів іоносферної нестійкості $t = 74$ хв. б) Присутній горизонтальний вітер зі швидкістю $U_x = 60$ м/с, горизонтальна швидкість іонів- $v_{i0x} = 20$ м/с, вертикальна швидкість іонів- $v_{i0z} = -5$ м/с, $t = 165$ хв.

Такі ефекти, проказані на Рис. 3 а, б, як значна величина іоносферного відгуку нестійкої іоносфери (що повинна стабілізуватися нелінійними процесами, не розглянутими в даній роботі), наявність в збуреннях електронної (іонної) концентрації чітко виділеної довжини хвилі порядку 800 км, зсув максимуму іоносферного відгуку на захід на декілька тисяч кілометрів відносно східного максимуму поля АГХ і утворення відносно просторово «зконцентрованої» області збурення іонної концентрації добре якісно узгоджуються з даними супутникових спостережень приєкваторіальних збурень іоносфери нижче максимуму електронної концентрації в області F.

Заключення. На основі проведених досліджень можна зробити такі заклчення.

1. Автором запропоновані оригінальні аналітичні і двовимірні чисельні моделі збудження просторового пакету АГХ і іоносферного відгуку середньоширотної і нестійкої приєкваторіальної областей F іоносфери.
2. Вперше отримані такі нові фізичні ефекти відгуку середньоширотної іоносфери, як: (1) вплив на іоносферний відгук спектральних особливостей просторового пакету АГХ літосферного походження, зокрема пов'язаних з наявністю реактивних мод в спектрі; (2) наявність максимуму залежності величини просторового максимуму відгуку іоносфери від періоду джерела АГХ; (3) наявність анізотропії відгуку в іоносфері на просторовий пакет АГХ, що може посилюватись в присутності вітру відповідного напрямку; (4) у рамках двовимірної і тривимірної моделей іоносферного відгуку показана наявність впливу «фактору форми» джерела на іоносферний відгук.
3. Вперше отримані якісні фізичні особливості іоносферного відгуку нестійкої приєкваторіальної іоносфери, а саме: значна величина іоносферного відгуку нестійкої іоносфери (що повинна стабілізуватися нелінійними процесами, не розглянутими в даній роботі), наявність в збуреннях електронної (іонної) концентрації чітко виділеної довжини хвилі порядку 800 км, зсув максимуму іоносферного відгуку на захід на декілька тисяч кілометрів відносно східного максимуму поля АГХ і утворення відносно просторово «зконцентрованої» області збурення концентрації плазми. При цьому отримане досить добре якісне узгодження основних рис теоретичної картини іоносферного відгуку і даних супутникових спостережень. Запропонована модель важлива, зокрема, з точки зору дослідження

системи „літосфера-атмосфера-іоносфера” як активного фільтру хвиль, що збуджені і поширюються крізь цю систему.

Подяка. Автор висловлює подяку Готиняну О. Є. за допомогу при проведенні чисельних розрахунків з використанням тривимірної моделі іоносферного відгуку на середніх широтах.

Посилання

1. Михайлов Ю. М., Михайлова Г. А., Дружин Г. И., Капустина О. В. Обнаружение атмосферных волн в спектрах мощности атмосферных помех на Камчатке // Геомagnetизм и аэрономия. – 2004. – Т. 44, № 2. – Р. 245-253.
2. Федоренко А. К., Лизунов Г. В., Роткель Х. Спутниковые наблюдения квазиволновых возмущений атмосферы на высотах области F, вызванных мощными землетрясениями // Геомagnetизм и аэрономия.- 2005.- Т. 45, № 3.-С. 403-410.
3. Gladishev V. A., Fishkova L. M. Optical research of seismoactivity effects of the ionosphere.// In: Electromagnetic phenomena related to earthquake prediction. Ed. M. Hayakawa, Y. Fujinawa.. -TERRAPUB Tokyo.- 1994.- pp. 375-380.
4. Ямпольский Ю. М., Зализовский А. В., Литвиненко Л. Н., Лизунов Г. В., Гровс К., Молдвин М. Вариации магнитного поля в Антарктике и сопряженном регионе (Новая Англия), стимулированные циклонической активностью // Радиофизика и радиоастрономия.- 2004.- Т. 9- С. 130-151.
5. Gotynyan O. E., Ivchenko V. M., Rapoport Yu. G. Model of the internal gravity waves excited by lithospheric greenhouse effect gases. // Space Science and technology. – 2001. Т. 7. Suppl., № 2. Р. 26-33.
6. Gotynyan O.E., Ivchenko V.M., Rapoport Yu.G., Parrot M. Ionospheric disturbances excited by the lithospheric gas source of acoustic gravity waves before earthquakes // Космічна наука і технологія. – 2003. – Додаток до т. 9, № 7.
7. Gotynyan O. E., Ivchenko V. M., Rapoport Yu. G. Connection between the characteristics of single lithospheric source of axcoustic-gravity

- waves and ionospheric response. // Space Science and technology. – 2003. -Т. 9, № 5.6.-P. 124-129.
8. Rapoport Yu. G., Gotynyan O.E. , Ivchenko V.M. , Kozak L.V., and Parrot M. Effect of acoutic-gravity wave of the lithospheric origin on ionospheric F region before earthquakes // Physics and Chemistry of the Earth. – 2004. – Vol. 29. – P. 607-616.
9. Rapoport Yu.G. Response of unstable near-equatorial plasma in the F ionospheric region to the spatial packet of acoustic-gravity waves of the lithospheric origin // Вісник київського університету, серія Фіз-Мат. науки.- 2005.- № 3.-С. 569-579.
- 10.Gokhberg M. B., Nekrasov A. K., Shalimov S. L. On the influence of unstable release of green-house effect gases in the seismically active regions on the ionosphere. // Physics of the Earth. -1996. -№8. –С.52-55.
- 11.Tronin A. A., Satellite thermal survey application for earthquake prediction, // in: Atmospheric and inospheric electromagnetic phenomena: associated -with earthquakes. Eds. M. Hayakawa. – TERRUPUB -Tokyo -1999.-pp. 717-746.
- 12.Hines C.O., Internal atmospheric gravity waves at ionospheric heights. // *Can. J. Phys.* -1960.- vol. 38, p.1441-1481.
- 13.А М Fedorchenko Теоретическая физика. Механика. Вища школа. Киев, 1975, 316 с.
- 14.Kendall P.C., and W. M. Pickering, Magnetoplasma diffusion at F2-region altitudes. // Planet Space Sci.- 1967.- 15.- С.825,.

Надійшла до редакції 18. 04. 2004

УДК 539.12

Марина С. Борисова¹, Юрій М.
Синюков²

**Спектри та кореляції в
гідродинамічному підході з
неперервною емісією при
енергіях RHIC.**

Проаналізовано одночастинкові спектри поперечного імпульсу та інтерферометричні радіуси в центральних Au+Au зіткненнях при енергіях RHIC в рамках гідродинамічно мотивованої параметризації з врахуванням неперервності емісії гадронів на протязі гідродинамічного розширювання фایрбола. Знайдено, що адекватний опис даних досягається для фізично обґрунтованого набору параметрів. Відтворено основні особливості експериментальних даних: зокрема, співвідношення поперечних радіусів близьке до одиниці та зменшується з ростом поперечного імпульсу пари піонів. Отриманий параметр температури емісії з поверхні гідродинамічної труби, приблизно співпадає з температурою хімічного фріз-ауту, що знайдена в Au+Au зіткненнях на RHIC.

Ключові слова: релятивістські зіткнення важких іонів, HBT кореляції, гідродинамічно-мотивовані параметризації.

¹ E-mail: ma@univ.kiev.ua, ma@voliacable.com

² E-mail: sinyukov@bitp.kiev.ua

Maryna S. Borysova¹, Yuri M.
Sinyukov²

**Spectra and correlations in
hydrodynamics approach with
continuous emission for RHIC
energies.**

We analyze single particle momentum spectra and interferometry radii in central RHIC Au+Au collisions within hydro-inspired parameterization accounting for continuous hadron emission through the whole lifetime of hydrodynamically expanding fireball. We found that adequate description of the data is achieved for physically reasonable set of parameters. The main features of the data are reproduced: in particular, the obtained ratio of the outward to sideward interferometry radii is less than unity and decreases when transverse momenta of pion pairs increase. The fitting temperature of emission from the surface of hydrodynamic tube approximately coincides with one found at chemical freeze-out in RHIC Au+Au collisions.

Key Words: relativistic heavy ion collisions, HBT correlations, hydro-inspired parameterization.

Introduction. Now there is common agreement that thermalized matter at unprecedented high energy density is created in relativistic heavy-ion collisions at RHIC [1]. The conclusion is based, in particular, on success of hydrodynamic models in description of measured single-particle hadron momentum spectra and elliptic flows [2]. This success gives, in principle, possibility to extract the equation of state (EoS) of the thermalized system and, then, provides insight into

the high temperature phase transitions of strongly interacting matter formed in heavy ion collisions at RHIC.

However a quantitative determination of the EoS in hydrodynamic approach is a nontrivial problem: it depends on the initial conditions and "freeze-out" prescription. The later is necessary since one cannot use hydrodynamic equations till infinitely large times: infinitesimally small final densities destroy the approximation of continuous medium of real particles. Usually, the freeze-out hypersurface which confines the 4-volume of hydrodynamic evolution is included as an external input with respect to hydrodynamic equations. Then, typically, particle spectra are described by the Cooper-Frye prescription (CFp) [3] which treats freeze-out as a sudden transition from local thermal equilibrium to free streaming that happens on some space-like 3D hypersurface, e.g., on a space-like part of the isotherm: $T \simeq m_\pi$ [4].

However, a real process of freeze-out, or particle liberation, is quite complicated because the particles escape from the system during the whole period of its evolution [5]. In present work we do not consider the whole complexity of the freeze-out process, instead we account for continuous in time emission process by applying the generalized Cooper-Frye prescription on enclosed freeze-out hypersurface. It is known that the protracted surface emission may lead to the ratio of the outward to sideward interferometry radii, R_{out}/R_{side} , much larger than unity in typical scenarios of phase transition in heavy ion collisions [6]. These expectations are, however, in contrast to current experimental data from RHIC where $R_{out}/R_{side} \simeq 1$ [7]. This discrepancy is a component of the so called "HBT puzzle" [8]. One might conclude that the duration of emission is very short and this could influence physical treatment of A+A collisions. However, R_{out}/R_{side} ratio is also quite sensitive to a form of freeze-out hypersurface, because, unlike R_{side} , R_{out} is a "mixture" of the "out" width, time spread of emission and the $r_{out} - t$ correlations. In the Gaussian approximation for the correlation function the interferometry radii can be expressed in terms of the space-time variances [9]:

$$R_i^2(p) = \langle (\Delta r_i - v_i \Delta t)^2 \rangle_p = \langle \Delta r_i^2 \rangle_p + v_i^2 \langle \Delta t^2 \rangle_p - 2v_i \langle \Delta r_i \Delta t \rangle_p \quad (1)$$

where $v_i = p_i / p_0$, p_i , r_i ($i = out, side, long$) are the Cartesian components of the vectors $\mathbf{v}$, $\mathbf{p}$ and $\mathbf{r}$ respectively, and $p^\mu = (p_0, p_{out}, 0, p_{long})$ is the mean 4-momentum of the two registered particles. Here $\Delta r_i = r_i - \langle r_i \rangle_p$, $\Delta t = t - \langle t \rangle_p$, and $\langle \dots \rangle_p$ denotes the averaged (by means of distribution function) value taken at some momentum p . It is seen from Eq. (1) that positive $r_{out} - t$ correlations, $\langle \Delta r_{out} \Delta t \rangle_p > 0$, give a negative contribution to R_{out} reducing thereby the R_{out}/R_{side} ratio. Therefore one can conclude that relatively small $R_{out}/R_{side} \simeq 1$ ratio in a case of a long time surface emission can take place if there are positive $r_{out} - t$ correlations in the corresponding sector of the freeze-out hypersurface. While a

bulk of hadrons are emitted from the sector with time-like normal (volume emission), the surface emission from the sector with the space-like normal can be, nevertheless, important for spectra and HBT radii formation [10], especially at relatively high p_T . A difference in temperatures and collective flows in different freeze-out sectors can increase the effect and thus a consistent description of the single particle spectra and interferometry radii can be reached in hydrodynamically-motivated models with enclosed freeze-out hypersurface that accounts for continuous in time character of particles emission. As a matter of fact in this work we generalize so called "blast wave" parameterization [11] for a realistic case of continuous emission over the whole lifetime of fireball.

Hydro-inspired parameterization of continuous hadronic freeze-out in central RHIC Au+Au collisions. We assume that particles are emitted from some 3D hypersurface when the fireball is in a locally equilibrated (l.eq) state,

$$f_i = f_{l.eq,i}(x, p) = (2\pi)^{-3} \left(\exp \left(\frac{u_\nu(x) p^\nu - \mu_i(x)}{T(x)} \right) \pm 1 \right)^{-1} \quad (2)$$

characterized by the common temperature $T(x)$, collective velocity field $u_\mu(x)$ and by the chemical potentials $\mu_i(x)$ for every particle species i . We refer the part of 3D hypersurface with the time-like normal vector as v -(volume) freeze-out, or final break-up, and the rest of the hypersurface with space-like normal vector as s -(surface) freeze-out corresponding to continuous emission prior to final break-up. Then the temperature and chemical potential fields are substituted in Eq. (2) by T_v, T_s and $\mu_{v,i}, \mu_{s,i}$ for v - and s - freeze-out respectively.

A longitudinally boost-invariant expansion is rather good approximation in mid-rapidity region at RHIC [12], therefore we assume the boost-invariance for longitudinal hydrodynamic velocities in this region, $v_L = z/t$, that allows us to parameterize t and $z \equiv r_{long}$ at 3D hypersurface σ by the form: $t_{v,s} = \tau_{v,s}(r) \cosh(\eta)$, $z_{v,s} = \tau(r) \sinh(\eta)$ in both sectors of the freeze-out hypersurface, where $\tau = \sqrt{t^2 - z^2}$ is the Bjorken proper time [13] and η is the longitudinal fluid rapidity, $\eta = \tanh^{-1} v_L$; r is the absolute value of transverse coordinate $\mathbf{r}_T = (r \cos \phi, r \sin \phi)$. Taking into account also the transverse velocity component $v(r, \tau)$ in the longitudinally co-moving system, we obtain for the collective 4-velocity:

$$u_{v,s}^\mu(r, \eta) = (\cosh \eta \cosh \eta_T^{v,s}, \sinh \eta_T^{v,s} \cos \phi, \sinh \eta_T^{v,s} \sin \phi, \sinh \eta \cosh \eta_T^{v,s}) \quad (3)$$

where $\eta_T^{v,s}(r, \tau_{v,s})$ is transverse fluid rapidity, $\eta_T = \tanh^{-1} v(r, \tau)$. The particle 4-momentum can be expressed through the momentum rapidity y , transverse momentum $\mathbf{p}_T$ and transverse mass $m_T = \sqrt{m^2 + p_T^2}$,

$$p^\mu = (m_T \cosh y, \mathbf{p}_T, m_T \sinh y). \quad (4)$$

Then

$$\frac{p_\mu u^\mu}{T} = \frac{mT}{T} \cosh(y - \eta) \cosh \eta_r - \frac{\mathbf{p}_T \cdot \mathbf{r}_T}{T r} \sinh \eta_r \quad (5)$$

The “volume” and “surface” elements of the freeze-out hypersurface $\sigma(x)$ take the form

$$d\sigma_{\mu}^{v,s} = n_{\mu}^{v,s} d\sigma = \pm \tau_{v,s}(r) d\eta dr_x dr_y (\cosh \eta_s - d\tau_{v,s}/dr_x, -d\tau_{v,s}/dr_y, \sinh \eta) \quad (6)$$

where

$$n_{\mu}^{v,s} = \frac{(\cosh \eta_s - d\tau_{v,s}/dr_x, -d\tau_{v,s}/dr_y, \sinh \eta)}{(\pm (1 - (d\tau_{v,s}/dr_x)^2 - (d\tau_{v,s}/dr_y)^2))^{1/2}} \quad (7)$$

and “+” and “-” correspond to the v - and s - sectors of the hypersurface respectively. The surface “moves” outwards with velocity less than the velocity of light, $|dr_s(\tau)/d\tau| < 1$, then $|d\tau_s(r)/dr| > 1$. At the s - sector of the freeze-out hypersurface σ $d\tau_s/dr_x, d\tau_s/dr_y > 0$, therefore the product $p^\mu n_\mu$ will be negative if p_r is sufficiently small. If it is the case then such particles do not really escape away from the system. For the particles with high transverse momenta $p^\mu n_\mu > 0$ and they are emitted from the surface of the system, practically, into vacuum streaming freely into detectors. To take this into account we use the modified Cooper-Frye prescription with the substitution [14, 15] $f_{1,q}(x, p) \rightarrow \theta(p^\mu n_\mu(x)) f_{1,q}(x, p)$ to get single particle spectra $p_0 d^3 N / d^3 p$ for diverse particle species

$$p_0 \frac{d^3 N}{d^3 p} = \int p^\mu d\sigma_\mu \theta(p^\mu n_\mu(x)) f_{1,q}(x, p) \quad (8)$$

where $p = (p_1 + p_2)/2$, $q = p_1 - p_2$ and the correlation function of pions $C(p, q)$ in the region of correlation peak in smoothness mass shell approximation:

$$C(p, q) \approx 1 + \frac{|\int p^{*\mu} d\sigma_\mu \theta(p^{*\mu} n_\mu(x)) f_{1,q}(x, p^*) \exp(iqx)|^2}{(\int p^{*\mu} d\sigma_\mu \theta(p^{*\mu} n_\mu(x)) f_{1,q}(x, p^*))^2} \quad (9)$$

where $p^{*\mu} = (\sqrt{m^2 + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2/2)^2}, (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2/2))$

We assume that the source of particles in central Au + Au RHIC collisions has cylindrical symmetry and is strongly stretched out in the beam direction (*long*-direction): the longitudinal size is much larger than the corresponding length of homogeneity [16]. The latter allows us to neglect finiteness of the system in longitudinal direction when we calculate particle spectra in mid-rapidity region near $y \approx 0$. As for transverse direction we assume that source has a finite geometrical size encoded in the limits of integration over r : $0 < r < R_f$ for v - emission and $R_i < r < R_f$ for s - emission, where R_i and R_f are the initial and finite effective radii of the system.

We choose the simple ansatz for $\tau(r)$ and transverse rapidity $\eta_r(r)$ aiming to

catch the main features of particles emission. We assume that the volume (space-like) emission happens as supposed in the blast-wave model at the constant $\tau_v(r) = \tau_f$, and the surface emission takes place during the whole time of hydrodynamic evolution of system: $\tau_i < \tau_s < \tau_f$, where τ_i is the initial time of thermalization. Because the fireballs formed in RHIC collisions expand in transverse direction with rather high transverse velocity, we can assume that $d\tau_s(r)/dr > 0$ for "surface" freeze-out. For the sake of simplicity we parameterize $d\tau_s(r)$ by linear function,

$$\tau_s(r) = a \cdot r + b \quad (12)$$

Taking into account that $\tau_s(R_i) = \tau_i$ and $\tau_s(R_f) = \tau_f$ where R_i and R_f are the initial and final transverse radii respectively, $R_i < R_f$, we obtain that

$$a = \frac{\tau_f - \tau_i}{R_f - R_i}, \quad b = \tau_i - \frac{\tau_f - \tau_i}{R_f - R_i} R_i \quad (13)$$

The chosen form of freeze-out $\tau(r)$ is presented in the Fig. 1.

To specify the transverse rapidity $\eta_T(r)$ we, first, tail smoothly the values of transverse rapidity in "volume" and "surface" sectors of hypersurface on their "border". Second, since a linear dependence of radial velocity profile on r was found in hydrodynamic simulations [17] for small transverse collective velocities $v \approx \eta_T$ near the centre of the system at fixed τ , we assume that transverse flow rapidity profile depends linearly on r for "volume" freeze-out at $\tau = \tau_f$: $\eta_T^v(r, \tau_f) = \eta_T^{\max} r / R_f$, where $\eta_T^{\max}$ is maximal transverse rapidity of fluid.

As for the transverse rapidity profile in the "surface" sector of freeze-out hypersurface, we analyzed simplest parameterization with zero and non-zero transverse rapidity at the initial time τ_i . Fittings of the data privilege a non-zero initial transverse velocity that do not contradict to approximate linearly with radius of rapidity profile also at early times. One of the simplest parameterizations that satisfied to this properties and allows us tail smoothly the values of transverse rapidity in the "volume" and "surface" sectors is the following transverse rapidity distribution:

$$\eta_T^s(r, \tau_s(r)) = \frac{\eta_T^{\max}}{R_f} \frac{\sqrt{(\tau_s(r) - \tau_i)^2 + r^2}}{\sqrt{(\tau_f - \tau_i)^2 + R_f^2}} \quad (14)$$

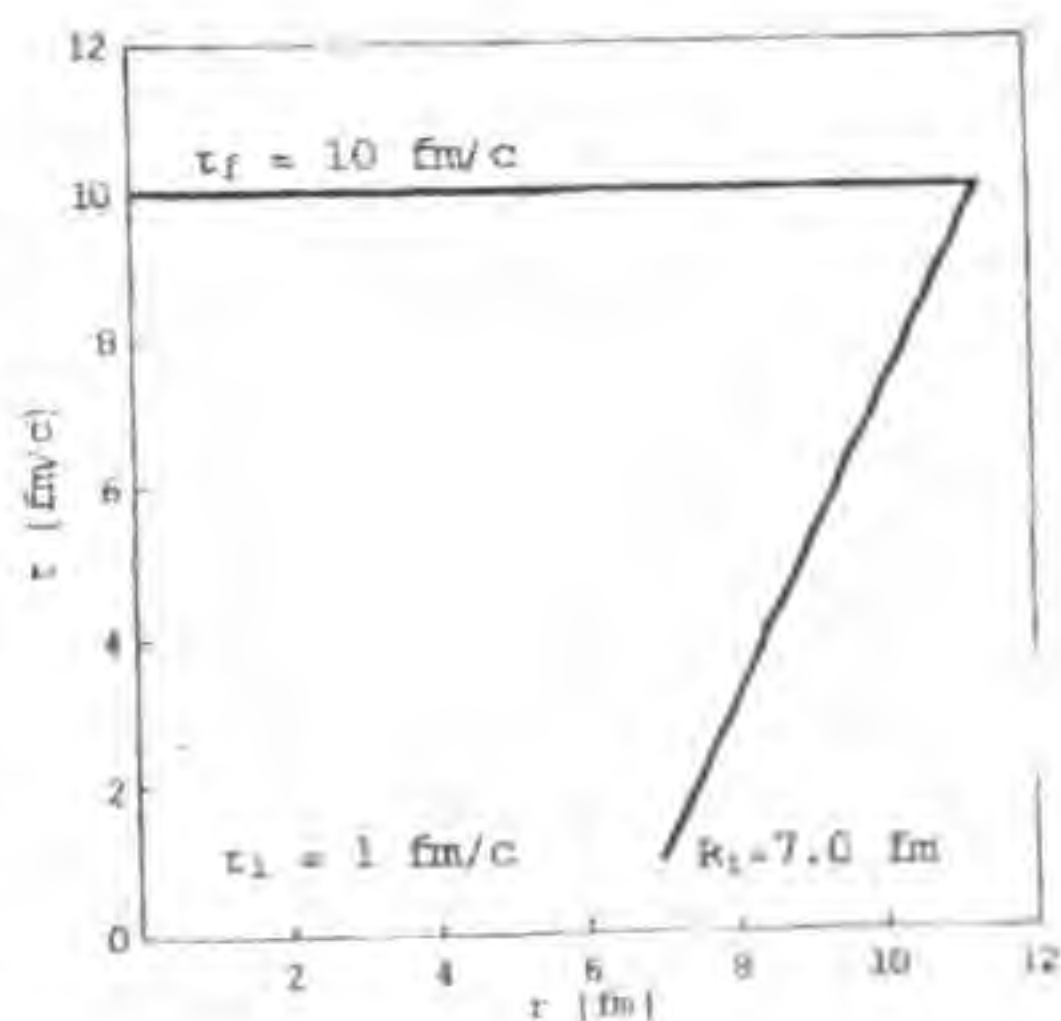


Figure 1: The enclosed freeze-out hypersurface $\tau(r)$. See the text for detail.

Note that $\tau_s(R_f) = \tau_f$ and $\eta_s^s(R_f, \tau_s(R_f)) = \eta_s^v(R_f, \tau_f) = \eta_s^{\max}$.

Results and discussion. We assume the common enclosed freeze-out hypersurface for all the particles we are interested in: pions, kaons and protons. Then the model contains 7 parameters which are independent on species of the particles: $\tau_i, \tau_f, R_i, R_f, T_s, T_a, \eta_s^{\max}$. As typically accepted, we suppose that at $\tau_i = 1$ fm/c the system is already in local thermal equilibrium and so will not consider this value as a free parameter. The chemical potentials $\mu_{s,j}$ that are different for diverse particle species j : negative pions, negative kaons and protons, are not fully free and their values are chosen to be closed to the results based on an analysis of particle number ratios. The reason is that a preliminary analysis shown a good fit for spectra and correlations formed on enclosed hypersurface cannot be reached if the "surface" temperature T_s is taken within standard range for kinetic freeze-out: $m_\pi \geq T_s \leq 100$ MeV, it should be taken higher then pion mass m_π . It forces us to conclude that the temperature of the surface emission is closed to the chemical freeze-out temperature or hadronization one, if chemical freeze-out happens at about the same time as is argued in [18]. Since a periphery of expanding system is less dense, the matter there is in the hadronic phase and hadrons can easily escape from this layer into surrounding vacuum despite relatively high temperature. This natural picture of the surface emission at the earlier times $\tau_s < \tau_f$ gives us possibility to fix $\mu_s = 0$ for pions and kaons, accounting for chemical equilibrium of pions at chemical freeze-out and almost zero net strangeness in central RHIC Au+Au collisions at the top energy. Then the result of free T_s parameter fit of pion and kaon spectra demonstrates that the best fit fixes T_s to the value 150 MeV, that is indeed very close to the chemical freeze-out temperature 157 ± 3 MeV obtained in [19]. This one justifies our assumption a posteriorly. The best fit of protons is achieved at $\mu_{s,p} = 40$ MeV that is slightly more than found in [19] value $\mu_{s,p} = 28.2 \pm 3.6$ MeV for baryochemical potential. Concerning the values $\mu_{v,j}$, it is readily to see that they are not free parameters in the model, because they should be fixed by means of the measured correspondent rapidity densities dN_j/dy .

In detail the situation is somewhat more complicated since resonance decays contribute to the particle spectra and interferometry radii [20]. About $1/2 \div 2/3$ of pions, kaons and protons comes from those decays after chemical freeze-out happens in high energy heavy ion collisions [21-23]. According to the results of Ref. [23] we neglect changing of slopes of particle transverse spectra due to decays of resonances and fit the pion interferometry radii starting from $m_T \approx 0.3$ GeV where the resonance contributions are fairly small.

The best fit is obtained for parameters that are shown in Tables 1 and 2. It is noteworthy, that the best fit is achieved when the system already at $\tau_i = 1$ fm/c expands in transverse direction with collective velocity field that reaches at the

system border ($r = R_s$) the value $v(R_s, \tau_s) \approx 0.34c$.

	μ_v, MeV	μ_s, MeV	$\frac{dN^{\text{reg}}/dy}{dN^{\text{th}}/dy}$
π^-	53	0	2.2
K^-	45	0	2.2
p	280	40	3.2

TABLE 1.: Model parameters from fits of Au+Au RHIC $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV data on π^- , K^- and p single particle spectra and π^- HBT radii. The ratio of registered particle numbers to thermal (primary) ones (last column) as well as μ_s for pions and kaons were kept invariable through fit procedures.

	$\tau_i, \text{fm}/c$	$\tau_f, \text{fm}/c$	R_i, fm	R_f, fm	T_v, MeV	T_s, MeV	η_T^{max}
π^-, K^-, p	1	10	7	11.3	110	150	0.73

TABLE 2.: Model parameters from fits of Au+Au RHIC $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV data on π^- , K^- and p single particle spectra and π^- HBT radii. The τ_i was kept invariable through fit procedures.

It may indicate that a noticeable contribution into build up of transverse flows at RHIC energies is given in earlier then 1 fm/c possibly pre-thermal stages of evolution.

The solid lines in Figs. 2, 3 demonstrate the fit according to our model and the dashed lines indicate the contributions to particle spectra and interferometry radii from "volume" freeze-out solely; the later corresponds, in fact, to blast-wave model calculations with our "volume" freeze-out parameters and $\Delta\tau = 0$. The experimental data are taken from [24-26]. The Boltzmann approximation of the distribution functions is used for the single particle spectra and interferometry radii calculations for all particle species. One can see from Fig. 2 that "surface" emission leads to a noticeable enhancement of the single particle momentum spectra in high p_T region, increasing thereby the inverse spectra slope. This happens because the particles with relatively low p_T emitted from the "surface" part of freeze-out hypersurface may re-enter the system and so their contribution to spectra is

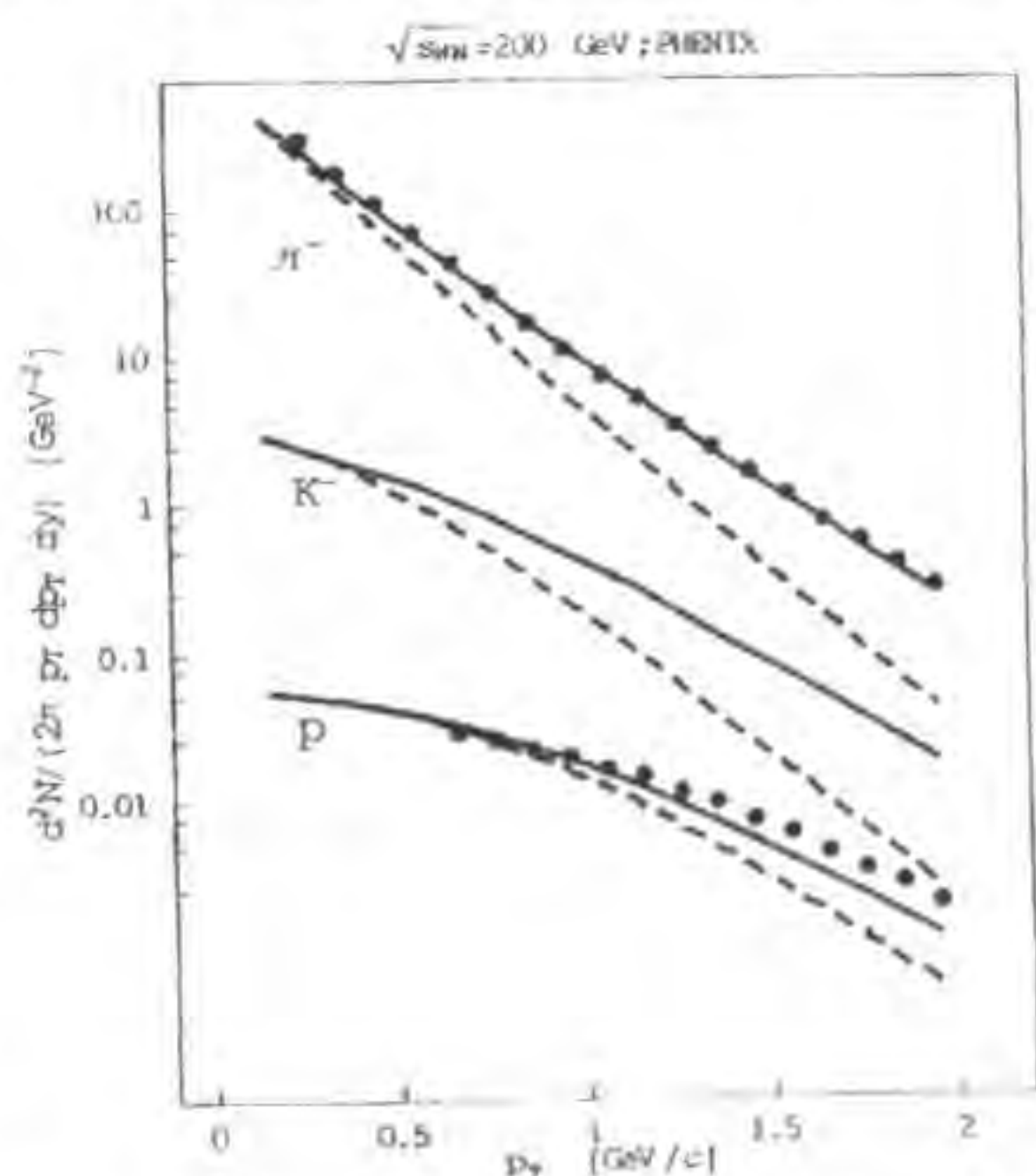


Figure 2: Comparison of the single-particle momentum spectra measured by the PHENIX Collaboration with the model calculations performed for whole enclosed hypersurface (solid lines) and for shelf-like part, solely (dashed lines). For convenience of plots location the measured p spectra are reduced in 100 times and K^- spectra in 8 times.

suppressed, while the particles with sufficiently high p_T are liberated freely. Note that in the blast-wave parameterization, that takes into account only “volume” emission, such a high effective temperature can be obtained only at the cost of very high transverse flow ($\eta_T^{\max} \approx 0.9$ and so $v^{\max} \approx 0.7c$, while in our parameterization $\eta_T^{\max} \approx 0.72$, $v^{\max} \approx 0.6c$) at freeze-out [11], that seems less realistic and is more difficult to reproduce in hydrodynamic models of the system evolution.

$$\sqrt{s_{NN}} = 200 \text{ GeV}; \pi^-; \star \text{ STAR}; \blacksquare \text{ PHENIX}$$

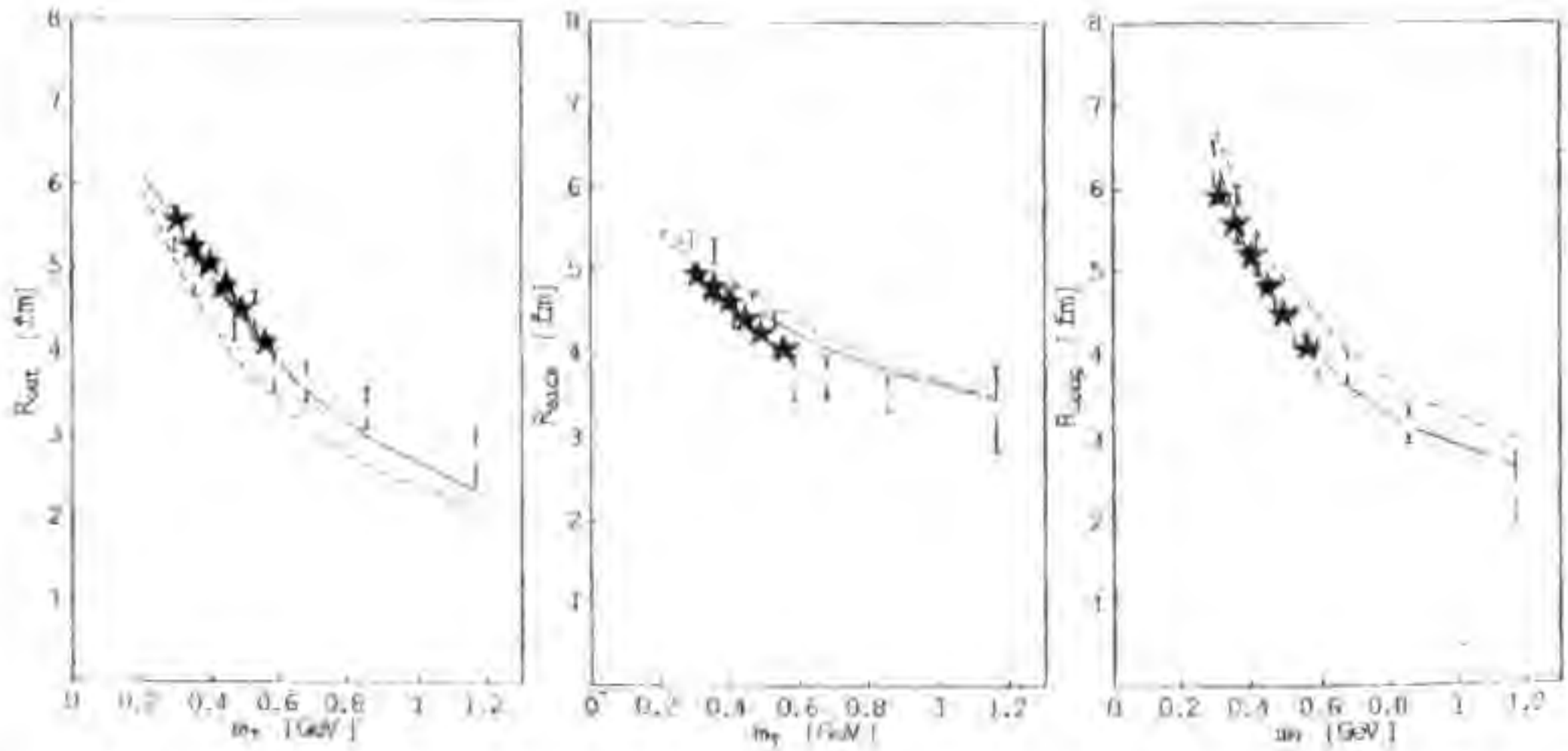


Figure 3: Comparison of the pion source R_{out} , R_{side} , R_{long} radii measured by the STAR (stars) and PHENIX (boxes) Collaborations with model calculations performed for whole enclosed hypersurface (solid line) and for shelf-like part only (dashed line). The PHENIX data are adjusted for most central bin (see the text for detail).

The Fig. 3 represents our results for the interferometry radii of negative pions. Note that the interferometry radii are measured by the PHENIX Collaboration for 0-30 % centrality events at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV [26]. Therefore, to adjust the results of PHENIX Collaboration to the most central 0-5% centrality bin, we increase the corresponding interferometry radii by factors calculated in accordance with N_{part} dependence of the Bertsch-Pratt radius parameters found in [26]. As one can see from Fig. 3, the interplay between (i) a long emission time, $\tau_f - \tau_i$, that gives an increase of the R_{out} radius, and (ii) the positive $r_{out} - t$ correlations at the “surface” part of hypersurface where $d\tau/dr > 0$, that reduces the radius, provides a moderate increase of R_{out} as compare with “volume” emission at constant τ . The R_{side} radius is almost not affected by the “surface” emission. As for R_{long} , it is less than in the “volume” emission case. The reason is that R_{long} is strongly affected by the value of the emission time τ [16] and, thereby, is reduced by the emission from early times $\tau < \tau_f$. This can explain an apparently low freeze-out value of τ in relativistic

heavy ion collisions if it is extracted supposing instantaneous “volume” emission at constant τ .

The Fig. 4 represents our result for R_{out}/R_{side} ratio. One can see that the “volume” blast-wave like emission (at a constant τ) leads to a rather low R_{out}/R_{side} ratio and, thereby, underestimates this quantity essentially. The “extra”-reduction of the value of R_{out} is typical for sharp freeze-out hypersurface with step density profile in out-direction, $n(r) \sim \theta(R - r_{out})$ and the maximal velocity on the

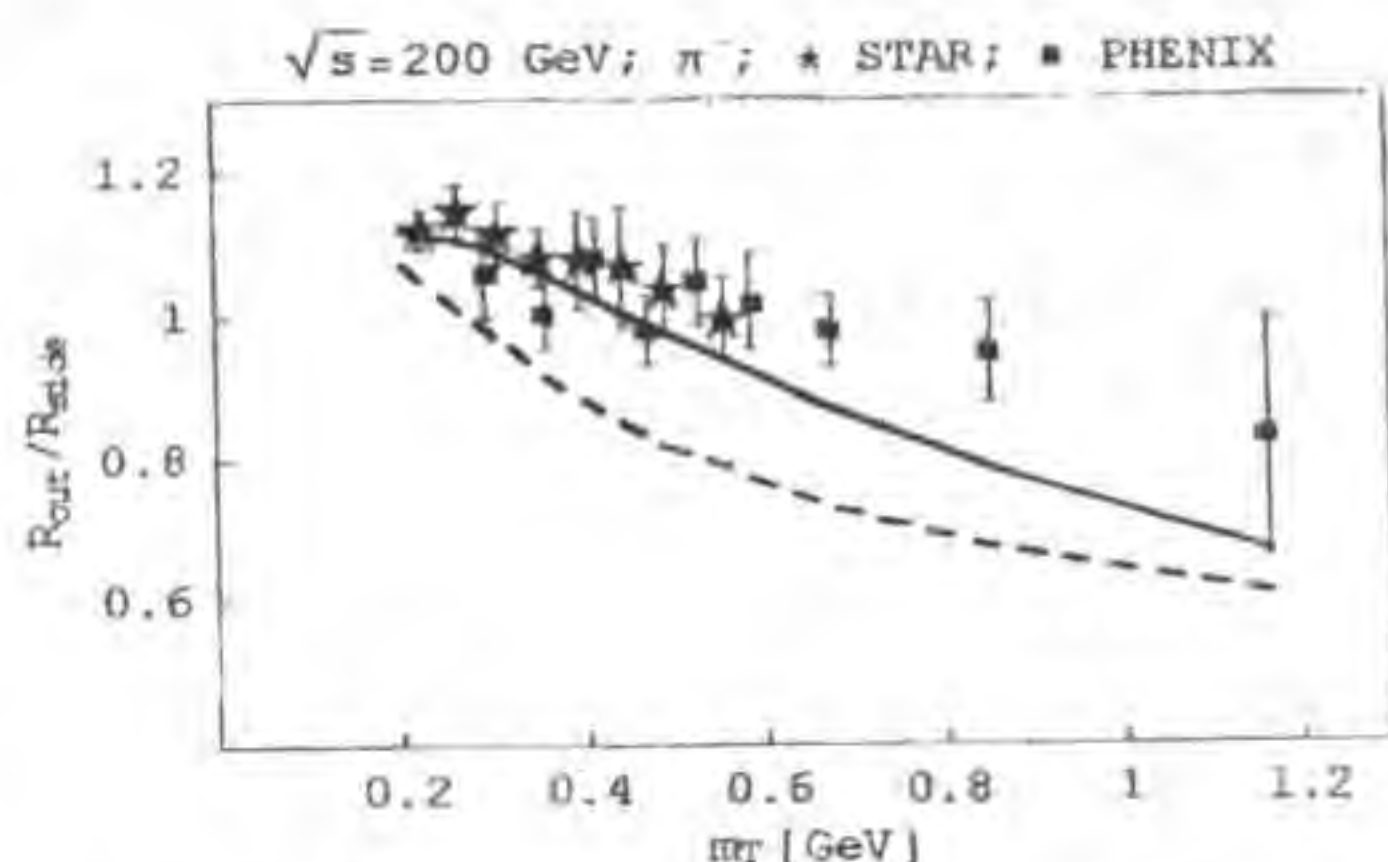


Figure 4: Comparison of the measured by the STAR (stars) and PHENIX (boxes) Collaborations pion R_{out}/R_{side} ratios with model calculations performed for whole enclosed hypersurface (solid line) and for shelf-like part only (dashed line).

edge. As one can see from Fig. 6 this effect becomes softer for enclosed freeze-out hypersurface despite the maximal velocity is also achieved at maximal transverse radius that system occupies during its evolution. However, the negative $t - r_{out}$ correlations can destroy the effect of relative reduction of R_{out} at all. That is why the positive $t - r_{out}$ correlations in our model are very important to achieve the satisfactory description of the experimental data.

Summary. We have studied the effect of long-time particle emission on particle spectra and interferometry radii basing on the hydro-inspired parameterization of enclosed freeze-out hypersurface and distribution functions. As a matter of fact our model generalizes the “blast-wave” parameterization that has difficulties in a fitting of the HBT radii and results in too large transverse velocities. We demonstrate that Au+Au RHIC $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV data on π^- , K^- and p single particle spectra and π^- interferometry radii can be described by physically reasonable set of parameters if rather protracted emission (~ 9 fm/c) from the “surface sector” of the hypersurface that “moves” outward is taken into account. The phase-space distribution of particles emitted from the surface prior to the fireball break-up is similar to the local chemical equilibrium distribution with parameters that are rather close to ones found at chemical freeze-out in RHIC Au+Au collisions. This could be a signature of the transformation of quark-gluon matter to hadron gas at the periphery of the system with subsequent hadronic emission just after such a transition from the boundary of the fireball during the whole time of system’s hydro evolution. Thereby, the simple physical arguments requiring the freeze-out hypersurface to be enclosed for finite

expanding systems result in successful description of hadronic spectra and interferometry radii. It means the particle emission from the early stages of fireball evolution has to be taken into account in advanced hydrodynamic models of A+A collisions.

Acknowledgments. The research described in this publication was made possible in part by Award No. UKP1-2613-KV-04 of the US CRDF. Research carried out within the scope of the ERG (GDRE). The work was also supported by NATO Collaborative Linkage Grant No. PST.CLG.980086.

References

1. RHIC Collaboration white papers: I. Arsene et.al.(The BRAHMS Collaboration), // Nucl. Phys. A 757, 1 (2005); B.B. Back et.al.(The PHOBOS Collaboration), // Nucl. Phys. A 757, 28 (2005); J.Adams et.al.(The STAR Collaboration), // Nucl. Phys. A 757, 102 (2005); K. Adcox et.al.(The PHENIX Collaboration), // Nucl. Phys. A 757, 184 (2005).
2. U. Heinz, Equation of State and Collective Dynamics // J. Phys.-2005.-G 31, S717-S725.
3. F. Cooper and G. Frye, Single-particle distribution in the hydrodynamic and statistical thermodynamic models of multiparticle production // Phys. Rev.-1974.-D 10.-P. 186-189.
4. Ландау Л.Д. О множественном образовании частиц при столкновениях быстрых частиц // Известия АН СССР, серия физ.-1953.-17.-С.51-64.
5. L.V. Bravina, K. Tywoniuk, E.E. Zabrodin, Freeze-out of strange hadrons at RHIC // J. Phys.-2005.-G 31.-S989-S993.
6. G.F. Bertsch, Pion interferometry as a probe of the plasma // Nucl. Phys.-1989.-A498.-P. 173-179; D.H. Rischke and M. Gyulassy, The Time-Delay Signature of Quark-Gluon-Plasma Formation in Relativistic Nuclear Collisions // Nucl. Phys.-1996.-A 608.-P. 479-512. S. Soff, S.A. Bass, and A. Dumitru, Pion Interferometry at RHIC: Probing a Thermalized Quark-Gluon Plasma? // Phys. Rev. Lett.-2001.-86.-P. 3981-3984.
7. H. Appelshauser, Correlations and fluctuations // J. Phys.-2004.-G 30.-P. S935-S942; D. Magestro, HBT: A (mostly) experimental overview // J.Phys.-2005.-G 31.-P.265-272.
8. U. Heinz, The quark gluon plasma at RHIC // Nucl. Phys.- 2003.-A721,-P30-39.
9. U.A. Wiedemann, U. Heinz, Particle Interferometry for Relativistic Heavy-Ion Collisions // Phys. Rep.-1999.-319.-P.145-230.
10. H. Heiselberg, HBT with Space- vs. time-like hydrodynamic freeze-out // Heavy Ion Phys.-1997.-5.-P.435-444.
11. F. Retiere, M. Lisa, Observable implications of geometrical and dynamical aspects of freeze-out in heavy ion collisions // Phys. Rev.-2004.-C70.-

- P.044907-32.; B. Tomasik, Collective dynamics of the fireball // Nucl. Phys.-2005.-A749.-P.209-218.
12. Peter F. Kolb, Ulrich Heinz, Hydrodynamic description of ultrarelativistic heavy-ion collisions, ArXiv: nucl-th/0305084
13. J.D. Bjorken, Highly relativistic nucleus-nucleus collisions: The central rapidity region // Phys. Rev.-1983.-D 27.-P. 140-151.
14. Yu.M. Sinyukov, Model of the mixed phase direct transition into free hadronic gas and transverse momenta of pions in ultrarelativistic nuclear collisions. // Z. Phys.-1989.-C43.-P401-425.
15. K.A. Bugaev, Shock-like Freeze-out in Relativistic Hydrodynamics // Nucl. Phys.-1996.-A 606.-P. 559-567.
16. Makhlin A.N., Sinyukov Yu.M. Hydrodynamics of hadron matter under pion interferometric microscope. // Z. Phys. – 1988. – 39. – p. 69-73.; Yu.M. Sinyukov, Hanbury Brown/Twiss correlations for expanding hadron and quark - gluon matter // Nucl.Phys.-1989.-A498.-P.151c-160c.
17. D. Teaney, J. Lauret, and E.V. Shuryak, A Hydrodynamic Description of Heavy Ion Collisions at the SPS and RHIC, arXiv: nucl-th/0110037, 28 p.
18. P. Braun-Munzinger, J. Stachel, C. Wetterich, Chemical freeze-out and the QCD phase transition temperature // Phys. Lett.-2004.-B596.-P.61-69.
19. M. Kaneta, Nu Xu, Centrality Dependence of Chemical Freeze-out in Au+Au Collisions at RHIC // arXiv:nucl-th/0405068, 6 p.
20. M. Gyulassy, S.S. Padula, Implications of pion interferometry for O + Au at 200-A/GeV // Phys. Lett.-1988.-B217.-P.181-185.
21. P. Braun-Munzinger, I. Heppe, and J. Stachel, Chemical equilibration in Pb + Pb collisions at the SPS // Phys. Lett.-1999.-B 465.-P. 15-20.
22. S.V. Akkelin, P. Braun-Munzinger, Yu.M. Sinyukov, Reconstruction of hadronization stage in Pb + Pb collisions at 158/A-GeV/C // Nucl.Phys.-2002.-A710.-P.439-465.
23. S.V. Akkelin, Yu.M. Sinyukov, Phase-space densities and effects of resonance decays in a hydrodynamic approach to heavy ion collisions // Phys. Rev.-2004.-C70.-P.064901.
24. S. S. Adler et al., (PHENIX Collaboration), Identified Charged Particle Spectra and Yields in Au+Au Collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV // Phys. Rev.-2004.-C 69.-P.-034909-32, arXiv:nucl-ex/0307022
25. J. Adams, (STAR Collaboration), Pion interferometry in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV // Phys. Rev.-2005.-C 71.-P.044906-21.
26. S.S. Adler, et al. (PHENIX Collaboration), Bose-Einstein Correlations of Charged Pion Pairs in Au+Au Collisions at $\sqrt{s_{NN}}=200$ GeV // Phys.Rev.Lett.-2004.-93.-P. 152302-6, arXiv:nucl-ex/0401003.

Надійшла до редакції 23.12.2005

Отпечатано в типографии ЧП Гой О.В.
01042, г. Киев ул. П.Лумумбы, 4/6 корпус А

Наукова бібліотека
ім. М. Максимовича

КНУ

ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА



12900JB

45 - чит зал періодики та дисерт Ц 10.00

